

明 細 書

3- (ジヒドロ (テトラヒドロ) イソキノリン-1-イル) キノリン化合物

5 技術分野

本発明は、3- (ジヒドロ (テトラヒドロ) イソキノリン-1-イル) キノリン化合物又はその塩、及びそれを有効成分として含有する農薬に関する。

背景技術

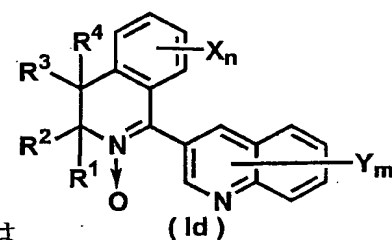
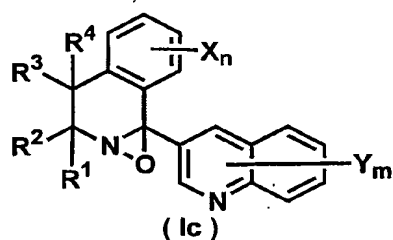
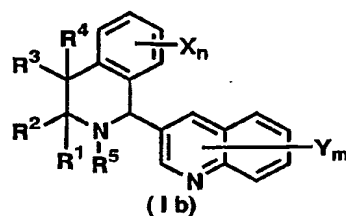
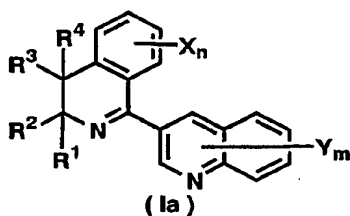
10 国際公開第00/42019号パンフレットおよび国際公開第02/06270号パンフレットには、ジヒドロイソキノリン環の3位と4位の間でシクロヘキサン環を形成している6-アリールフェナンスリジン化合物がPDE4阻
害剤として、また、特開2003/171381号公報には、ジヒドロイソキノ
リン環の7位と8位の間でジヒドロフラン環を形成している6-アリールフロイ
15 ソキノリン化合物がエントリー阻害剤として記載されているが、イソキノリン環
が別の環と縮合していない3-ジヒドロイソキノリン-1-イルキノリン化合物
は記載されておらず、また、農園芸用殺菌剤に関する記載もない。また、Indian
Journal of Chemistry 1969; 7(10), 1010-1016、同文献1970, 8(6), 505-508、
同文献1985, 24B(7), 737-746、および同文献1986, 25B(10), 1072-1078 には、
20 3- (ジヒドロ (テトラヒドロ) イソキノリン-1-イル) キノリン化合物の合
成の記載があるが、イソキノリン環の3位が2つの置換基により置換されている
3- (ジヒドロ (テトラヒドロ) イソキノリン-1-イル) キノリン化合物は記
載されておらず、また、農園芸用殺菌剤に関する記載もない。このように、イソ
キノリン環の3位が2つの置換基により置換されている3- (ジヒドロ (テトラ
25 ヒドロ) イソキノリン-1-イル) キノリン化合物が農園芸用殺菌剤として使用
できることは従来知られていない。

本発明者らは、3- (ジヒドロ (テトラヒドロ) イソキノリン-1-イル) キノリン化合物について鋭意研究を重ねた結果、イソキノリン環の3位が2置換であり、かつ、イソキノリン環に他の環が縮合していない3- (ジヒドロ (テトラ

ヒドロ) イソキノリン-1-イル) キノリン化合物が、種々の植物病害に対し優れた殺菌活性を有し農薬の有効成分として有用であり、特に、植物のかび病のなかでも農園芸作物に対してしばしば重篤な被害を与えるイネいもち病 (*Pyricularia oryzae*) 並びにトマト、キュウリ及びインゲンの灰色かび病 (*Botrytis cinerea*) に対して低薬量で防除が可能であることを見出し、本発明を完成した。

発明の開示

本発明は、一般式 (I a)、(I b)、(I c) 又は (I d)、:



、又は

(式中、

R^1 及び R^2 は、同一、若しくは異なってもよく、

ハロゲン原子、 $C_1 \sim C_6$ アルコキシ基、 $C_1 \sim C_6$ アルキルチオ基及びフェノキシ基からなる群から選ばれる同一若しくは異なった1~3個の置換基で置換されてよい $C_1 \sim C_6$ アルキル基；

ハロゲン原子、同一若しくは異なった1~3個のハロゲン原子で置換されてよい $C_1 \sim C_6$ アルキル基、 $C_1 \sim C_6$ アルコキシ基、同一若しくは異なった1~2個の $C_1 \sim C_6$ アルキル基又はアシル基で置換されてよいアミノ基、ニトロ基、シアノ基、水酸基、メルカプト基及び $C_1 \sim C_6$ アルキルチオ基からなる群から選ばれ

る同一若しくは異なった1～6個の置換基で置換されてよいアリール基；

ハロゲン原子、同一若しくは異なった1～3個のハロゲン原子で置換されてよい $C_1\sim C_6$ アルキル基及び $C_1\sim C_6$ アルコキシ基からなる群から選ばれる同一若しくは異なった1～6個の置換基で置換されてよいヘテロアリール基；

- 5 ハロゲン原子、同一若しくは異なった1～3個のハロゲン原子で置換されてよい $C_1\sim C_6$ アルキル基、 $C_1\sim C_6$ アルコキシ基、同一若しくは異なった1～2個の $C_1\sim C_6$ アルキル基又はアシル基で置換されてよいアミノ基、ニトロ基、シアノ基、水酸基、メルカプト基及び $C_1\sim C_6$ アルキルチオ基からなる群から選ばれる同一若しくは異なった1～6個の置換基で置換されてよいアラルキル基であるか、又は、
- 10

R^1 と R^2 が一緒になって、ハロゲン原子、 $C_1\sim C_6$ アルキル基、 $C_1\sim C_6$ アルコキシ基及びフェノキシ基からなる群から選ばれる同一若しくは異なった1～3個の置換基で置換されてよい $C_3\sim C_{10}$ シクロアルキル環を表し、

R^3 及び R^4 は、同一、若しくは異なってもよく、

- 15 水素原子；

ハロゲン原子、 $C_1\sim C_6$ アルコキシ基、 $C_1\sim C_6$ アルキルチオ基及びフェノキシ基からなる群から選ばれる同一若しくは異なった1～3個の置換基で置換されてよい $C_1\sim C_6$ アルキル基；

ハロゲン原子；

- 20 $C_1\sim C_6$ アルキレン基；

$C_1\sim C_6$ アルコキシ基；

水酸基；若しくは

ケト基であるか、又は、

- 25 R^3 と R^4 が一緒になって、ハロゲン原子、 $C_1\sim C_6$ アルキル基、 $C_1\sim C_6$ アルコキシ基及びフェノキシ基からなる群から選ばれる同一若しくは異なった1～3個の置換基で置換されてよい $C_3\sim C_{10}$ シクロアルキル環を表し、

R^5 は、

水素原子、アシル基；又は

ハロゲン原子、 $C_1\sim C_6$ アルコキシ基、 $C_1\sim C_6$ アルキルチオ基及びフェノキ

シ基からなる群から選ばれる同一若しくは異なった1～3個の置換基で置換されてよい $C_1\sim C_6$ アルキル基を示し、

Xは、ハロゲン原子；

5 ハロゲン原子、 $C_1\sim C_6$ アルコキシ基、水酸基、 $C_1\sim C_6$ アルコキシカルボニル基及びフェノキシ基からなる群から選ばれる同一若しくは異なった1～3個の置換基で置換されてよい $C_1\sim C_6$ アルキル基；

ハロゲン原子、 $C_1\sim C_6$ アルコキシ基、 $C_1\sim C_6$ アルコキシカルボニル基、フェニル基及びフェノキシ基からなる群から選ばれる同一若しくは異なった1～3個の置換基で置換されてよい $C_2\sim C_6$ アルケニル基；

10 ハロゲン原子、 $C_1\sim C_6$ アルコキシ基及びフェノキシ基からなる群から選ばれる同一若しくは異なった1～3個の置換基で置換されてよい $C_2\sim C_6$ アルキニル基；

ハロゲン原子、同一若しくは異なった1～3個のハロゲン原子で置換されてよい $C_1\sim C_6$ アルキル基、 $C_1\sim C_6$ アルコキシ基、同一若しくは異なった1～2個の $C_1\sim C_6$ アルキル基又はアシル基で置換されてよいアミノ基、ニトロ基、シアノ基、水酸基、メルカプト基及び $C_1\sim C_6$ アルキルチオ基からなる群から選ばれる同一若しくは異なった1～6個の置換基で置換されてよいアリール基；

15 ハロゲン原子、同一若しくは異なった1～3個のハロゲン原子で置換されてよい $C_1\sim C_6$ アルキル基及び $C_1\sim C_6$ アルコキシ基からなる群から選ばれる同一若しくは異なった1～6個の置換基で置換されてよいヘテロアリール基；

$C_1\sim C_6$ アルコキシ基；

20 同一若しくは異なった1～2個の $C_1\sim C_6$ アルキル基又はアシル基で置換されてよいアミノ基；

アシル基；

25 シアノ基；又は、

$C_1\sim C_6$ アルキル基、 $C_2\sim C_6$ アルケニル基、 $C_2\sim C_6$ アルキニル基、アラルキル基、アリール基及びヘテロアリール基からなる群から選ばれる置換基で水酸基の水素原子が置換されてよいN-ヒドロキシアルカンイミドイル基を表し、

Yは、ハロゲン原子、 $C_1\sim C_6$ アルキル基、 $C_1\sim C_6$ アルコキシ基及び水酸基

からなる群から選ばれる置換基を表し、

nは、0～4の整数を表し、

mは、0～6の整数を表す)

で表される化合物又はその塩である。

5

発明を実施するための最良の形態

本発明において、「 $C_1 \sim C_6$ アルキル基」は、例えば、メチル基、エチル基、プロピル基、イソプロピル基、ブチル基、イソブチル基、s-ブチル基、t-ブチル基、ペンチル基、イソペンチル基、2-メチルブチル基、ネオペンチル基、
10 1-エチルプロピル基、ヘキシル基、4-メチルペンチル基、3-メチルペンチル基、2-メチルペンチル基、1-メチルペンチル基、3, 3-ジメチルブチル基、2, 2-ジメチルブチル基、1, 1-ジメチルブチル基、1, 2-ジメチルブチル基、1, 3-ジメチルブチル基、2, 3-ジメチルブチル基、2-エチルブチル基のような炭素数1乃至6個の直鎖又は分枝鎖アルキル基であり、好適には、炭素数1乃至5個の直鎖又は分枝鎖アルキル基 ($C_1 \sim C_5$ アルキル基) であり、より好適には、炭素数1乃至4個の直鎖又は分枝鎖アルキル基 ($C_1 \sim C_4$ アルキル基) であり、更により好適には、炭素数1乃至3個の直鎖又は分枝鎖アルキル基 ($C_1 \sim C_3$ アルキル基) であり、特に好適には、メチル基、エチル基又はプロピル基であり、最も好適には、メチル基又はエチル基である。

20 本発明において、「 $C_2 \sim C_6$ アルケニル基」は直鎖又は分枝鎖状のいずれであっていてもよく、1以上の任意の個数の二重結合を含むことができる。例えば、ビニル基、プロパー1-エン-1-イル基、アリル基、イソプロペニル基、ブター1-エン-1-イル基、ブター2-エン-1-イル基、ブター3-エン-1-イル基、2-メチルプロパー2-エン-1-イル基、1-メチルプロパー2-エン-1-イル基、
25 ペンター1-エン-1-イル基、ペンター2-エン-1-イル基、ペンター3-エン-1-イル基、ペンター4-エン-1-イル基、3-メチルブター2-エン-1-イル基、3-メチルブター3-エン-1-イル基、ヘキサ-1-エン-1-イル基、ヘキサ-2-エン-1-イル基、ヘキサ-3-エン-1-イル基、ヘキサ-4-エン-1-イル基、ヘキサ-5-エン-1-イル基、

4-メチルペンター3-エン-1-イル基などを例示することができる。

本発明において、「 $C_2 \sim C_6$ アルキニル基」は直鎖又は分枝鎖状のいずれであつてもよく、1以上の任意の個数の三重結合を含むことができる。例えば、エチニル基、プロパー1-イン-1-イル基、プロパー2-イン-1-イル基、ブター1-イン-1-イル基、ブター3-イン-1-イル基、1-メチルプロパー2-イン-1-イル基、ペンター1-イン-1-イル基、ペンター4-イン-1-イル基、ヘキサー1-イン-1-イル基、ヘキサー5-イン-1-イル基などを例示することができる。

本発明において、「アリール基」は、フェニル基、1-ナフチル基、2-ナフチル基、アントラセニル基、フェナントレニル基、アセナフチレニル基などを例示することができる。

本発明において、「ヘテロアリール基」は、単環性又は多環性のいずれであつてもよく、1個又は2個以上の同一又は異なる環構成ヘテロ原子を含むヘテロアリール基を用いることができる。ヘテロ原子の種類は特に限定されないが、例えば、窒素原子、酸素原子、硫黄原子などを例示することができる。ヘテロアリール基としては、例えば、フリル基、チエニル基、ピロリル基、オキサゾリル基、イソオキサゾリル基、ジヒドロイソオキサゾリル基、チアゾリル基、イソチアゾリル基、イミダゾリル基、ピラゾリル基、オキサジアゾリル基、チアジアゾリル基、トリアゾリル基、テトラゾリル基、ピリジル基、アゼピニル基、オキサゼピニル基などの5乃至7員の単環式ヘテロアリール基が挙げられる。ヘテロアリールアルキル基を構成する多環性ヘテロアリール基としては、ベンゾフラニル基、イソベンゾフラニル基、ベンゾチエニル基、インドリル基、イソインドリル基、インダゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、ベンゾイソオキサゾリル基、ベンゾチアゾリル基、ベンゾイソチアゾリル基、ベンゾオキサジアゾリル基、ベンゾチアジアゾリル基、ベンゾトリアゾリル基、キノリル基、イソキノリル基、シンノリニル基、キナゾリニル基、キノキサリニル基、フタラジニル基、ナフチリジニル基、プリニル基、プテリジニル基、カルバゾリル基、カルボリニル基、アクリジニル基、2-アクリジニル、3-アクリジニル、4-アクリジニル、9-アクリジニル、フェノキサジニル基、フェノチアジニル基、フェナジニル基などの8乃

至14員の多環性ヘテロアリール基が挙げられる。

本発明において、「アラルキル基」としては、前記「 $C_1 \sim C_6$ アルキル基」の1つ又は2つ以上の水素原子が前記「アリール基」で置換された基が挙げられる。例えば、ベンジル基、1-ナフチルメチル基、2-ナフチルメチル基、アントラセニルメチル基、フェナントレニルメチル基、アセナフチレニルメチル基、ジフェニルメチル基、1-フェネチル基、2-フェネチル基、1-(1-ナフチル)エチル基、1-(2-ナフチル)エチル基、2-(1-ナフチル)エチル基、2-(2-ナフチル)エチル基、3-フェニルプロピル基、3-(1-ナフチル)プロピル基、3-(2-ナフチル)プロピル基、4-フェニルブチル基、4-(1-ナフチル)ブチル基、4-(2-ナフチル)ブチル基、5-フェニルペンチル基、5-(1-ナフチル)ペンチル基、5-(2-ナフチル)ペンチル基、6-フェニルヘキシル基、6-(1-ナフチル)ヘキシル基、6-(2-ナフチル)ヘキシルなどを例示することができる。

本発明において、「 $C_3 \sim C_{10}$ シクロアルキル基」は、例えば、シクロブチル基、シクロペンチル基、シクロヘキシル基、シクロヘプチル基、ノルボルニル基のような炭素数3~10個の単環又は複環シクロアルキル基であり、好適には、シクロペンチル基、シクロヘキシル基又はシクロヘプチル基であり、より好適には、シクロペンチル基である。

本発明において、「ハロゲン原子」は、フッ素原子、塩素原子、臭素原子又はヨウ素原子であり、好適には、フッ素原子、塩素原子又は臭素原子であり、より好適には、フッ素原子又は塩素原子であり、最も好適には、フッ素原子である。

本発明において、「 $C_1 \sim C_6$ アルコキシ基」は、例えば、メトキシ基、エトキシ基、プロポキシ基、イソプロポキシ基、ブトキシ基、イソブトキシ基、s-ブトキシ基、t-ブトキシ基、ペンチルオキシ基、イソペンチルオキシ基、2-メチルブトキシ基、ネオペンチルオキシ基、1-エチルプロポキシ基、ヘキシルオキシ基、(4-メチルペンチル)オキシ基、(3-メチルペンチル)オキシ基、(2-メチルペンチル)オキシ基、(1-メチルペンチル)オキシ基、3,3-ジメチルブトキシ基、2,2-ジメチルブトキシ基、1,1-ジメチルブトキシ基、1,2-ジメチルブトキシ基、1,3-ジメチルブトキシ基、2,3-ジメ

チルプトキシ基、2-エチルプトキシ基のような炭素数1乃至6個の直鎖又は分枝鎖アルコキシ基であり、好適には、炭素数1乃至4個の直鎖又は分枝鎖アルコキシ基 ($C_1 \sim C_4$ アルコキシ基) であり、より好適には、メトキシ基、エトキシ基又はイソプロポキシ基であり、更により好適には、メトキシ基又はエトキシ基であり、最も好適には、メトキシ基である。

本発明において、「 $C_1 \sim C_6$ アルキルチオ基」は、例えば、メチルチオ基、エチルチオ基、プロピルチオ基、イソピルチオ基、ブチルチオ基、イソペンチルチオ基、ネオペンチルチオ基、3, 3-ジメチルブチルチオ基、2-エチルブチルチオ基のような炭素数1乃至6個の直鎖又は分枝鎖アルキルチオ基であり、好適には、炭素数1乃至4個の直鎖又は分枝鎖アルキルチオ基であり、より好適には、メチルチオ基である。

本発明において、「アシル基」は、例えば、ホルミル基、前記「 $C_1 \sim C_6$ アルキル基」が結合したカルボニル基 ($C_2 \sim C_7$ アルキルカルボニル基)、前記「 $C_2 \sim C_6$ アルケニル基」が結合したカルボニル基 ($C_3 \sim C_7$ アルケニルカルボニル基)、前記「アリール基」が結合したカルボニル基 (「アリールカルボニル基」)、前記「 $C_1 \sim C_6$ アルコキシ基」が結合したカルボニル基 ($C_2 \sim C_7$ アルコキシカルボニル基) 又は前記「同一若しくは異なった1~2個の $C_1 \sim C_6$ アルキル基で置換されてよいアミノ基」が結合したカルボニル基 ($C_2 \sim C_7$ アルキルアミノカルボニル基) であり、好適には、炭素数2~5個の直鎖又は分枝鎖アルキルカルボニル基 ($C_2 \sim C_5$ アルキルカルボニルオキシ基)、炭素数2~7個のアルキルアミノカルボニル基 ($C_2 \sim C_7$ アルキルアミノカルボニル基) であり、より好適には、アセチル基又はメチルアミノカルボニル基である。

本発明において、「同一若しくは異なった1~3個のハロゲン原子で置換されてよい $C_1 \sim C_6$ アルキル基」は、前記「 $C_1 \sim C_6$ アルキル基」の他に、例えば、トリフルオロメチル基、トリクロロメチル基、ジフルオロメチル基、ジクロロメチル基、ジブromoメチル基、フルオロメチル基、クロロメチル基、ブromoメチル基、ヨードメチル基、2, 2, 2-トリクロロエチル基、2, 2, 2-トリフルオロエチル基、2-ブromoエチル基、2-クロロエチル基、2-フルオロエチル基、3-クロロプロピル基、3, 3, 3-トリフルオロプロピル基、4-フルオ

ロブチル基、3-フルオロ-2-メチルプロピル基、3, 3, 3-トリフルオロ-2-メチルプロピル基、6, 6, 6-トリクロロヘキシル基のような同一若しくは異なった1~3個の前記「ハロゲン原子」により置換された前記「 $C_1 \sim C_6$ アルキル基」であり、好適には、同一若しくは異なった1~3個の前記「ハロゲン原子」により置換されてよい前記「 $C_1 \sim C_4$ アルキル基」であり、より好適には、同一若しくは異なった1~3個の「フッ素原子又は塩素原子」により置換されてよい前記「 $C_1 \sim C_3$ アルキル基」であり、更により好適には、メチル基、エチル基、プロピル基、クロロメチル基又はトリフルオロメチル基であり、特に好適には、メチル基、エチル基又はトリフルオロメチル基である。

本発明において、「 $C_1 \sim C_6$ アルキル基、 $C_2 \sim C_6$ アルケニル基、 $C_2 \sim C_6$ アルキニル基、アラルキル基、アリール基、及びヘテロアリール基からなる群から選ばれる置換基で水酸基の水素原子が置換されてよいN-ヒドロキシアルカンイミドイル基」は、例えば、ヒドロキシイミノメチル基、N-ヒドロキシエタンイミドイル基、N-ヒドロキシプロパンイミドイル基、N-ヒドロキシブタンイミドイル基のような炭素数1~6個のN-ヒドロキシアルカンイミドイル基の水酸基が前記「 $C_1 \sim C_6$ アルキル基」、前記「 $C_2 \sim C_6$ アルケニル基」、前記「 $C_2 \sim C_6$ アルキニル基」、前記「アラルキル基」、前記「アリール基」、及び前記「ヘテロアリール基」により置換された基が挙げられる。例えば、メトキシイミノメチル基、N-メトキシエタンイミドイル基、N-エトキシエタンイミドイル基、N-プロトキシアルカンイミドイル基、N-アリルオキシエタンイミドイル基、N-フェノキシエタンイミドイル基、N-メトキシプロパンイミドイル基、N-メトキシブタンイミドイル基、N-メトキシヘキサンイミドイル基が挙げられる。

本発明において、「ハロゲン原子、 $C_1 \sim C_6$ アルコキシ基及びフェノキシ基からなる群から選ばれる同一若しくは異なった1~3個の置換基で置換されてよい $C_1 \sim C_6$ アルキル基」は、前記「 $C_1 \sim C_6$ アルキル基」及び前記「同一若しくは異なった1~3個のハロゲン原子で置換されてよい $C_1 \sim C_6$ アルキル基」の他に、例えば、メトキシメチル基、エトキシメチル基、エトキシエチル基、プロポキシメチル基などの同一若しくは異なった1~3個の前記「 $C_1 \sim C_6$ アルコキシ基」により置換された前記「 $C_1 \sim C_6$ アルキル基」、フェノキシメチル基、フェノキ

シエチル基などのフェノキシ基により置換された前記「 $C_1 \sim C_6$ アルキル基」、及び2-メトキシ-1-クロロメチル基、3-フェノキシ-2-ブロモ-2-メトキシプロピル基など、ハロゲン原子、前記 $C_1 \sim C_6$ アルコキシ基及びフェノキシ基からなる群から選ばれる2種以上の置換基により置換された前記「 $C_1 \sim C_6$ アルキル基」も含む。

本発明において、「ハロゲン原子、 $C_1 \sim C_6$ アルコキシ基、フェニル基及びフェノキシ基からなる群から選ばれる同一若しくは異なった1~3個の置換基で置換されてよい $C_2 \sim C_6$ アルケニル基」は、前記「 $C_2 \sim C_6$ アルケニル基」の他、3-クロロアリル基、4-ブロモ-2-ブテニル基などの同一若しくは異なった1~3個のハロゲン原子で置換された前記「 $C_2 \sim C_6$ アルケニル基」、3-メトキシ-2-プロペニル基、4-エトキシ-3-ブテニル基などの同一若しくは異なった1~3個の前記「 $C_1 \sim C_6$ アルコキシ基」により置換された前記「 $C_2 \sim C_6$ アルケニル基」、1-フェニルビニル基、スチリル基、シンナミル基などのフェニル基により置換された前記「 $C_2 \sim C_6$ アルケニル基」、3-フェノキシ-2-ブテニル基などのフェノキシ基により置換された前記「 $C_2 \sim C_6$ アルケニル基」、及び4-メトキシ-3-クロロ-2-ブテニル基など、ハロゲン原子、前記 $C_1 \sim C_6$ アルコキシ基及びフェノキシ基からなる群から選ばれる2種以上の置換基により置換された前記「 $C_2 \sim C_6$ アルケニル基」も含む。

本発明において、「ハロゲン原子、 $C_1 \sim C_6$ アルコキシ基及びフェノキシ基からなる群から選ばれる同一若しくは異なった1~3個の置換基で置換されてよい $C_2 \sim C_6$ アルキニル基」は、前記「 $C_2 \sim C_6$ アルキニル基」の他、3-クロロ-2-プロピニル基、4-ブロモ-2-ブチニル基などの同一若しくは異なった1~3個のハロゲン原子で置換された前記「 $C_2 \sim C_6$ アルキニル基」、3-メトキシ-2-プロピニル基、4-エトキシ-3-ブチニル基などの同一若しくは異なった1~3個の前記「 $C_1 \sim C_6$ アルコキシ基」により置換された前記「 $C_2 \sim C_6$ アルキニル基」、3-フェノキシ-2-ブチニル基などのフェノキシ基により置換された前記「 $C_2 \sim C_6$ アルキニル基」、及び4-メトキシ-4-クロロ-2-ブチニル基など、ハロゲン原子、前記 $C_1 \sim C_6$ アルコキシ基及びフェノキシ基からなる群から選ばれる2種以上の置換基により置換された前記「 $C_2 \sim C_6$ ア

ルキニル基」も含む。

5 本発明において、「同一若しくは異なった1～2個の $C_1\sim C_6$ アルキル基又はアシル基で置換されてよいアミノ基」は、アミノ基の他に、同一若しくは異なった1～2個の前記「 $C_1\sim C_6$ アルキル基」又は同一若しくは異なった1～2個の前記「アシル基」が置換したアミノ基であり、好適には、同一若しくは異なった1～2個の前記「 $C_1\sim C_4$ アルキル基」又は同一若しくは異なった1～2個の前記「アシル基」が置換したアミノ基であり、より好適には、ジメチルアミノ基、ジェチルアミノ基、又はアセチルアミノ基である。

10 本発明において、「ハロゲン原子、同一若しくは異なった1～3個のハロゲン原子で置換されてよい $C_1\sim C_6$ アルキル基、 $C_1\sim C_6$ アルコキシ基、同一若しくは異なった1～2個の $C_1\sim C_6$ アルキル基又はアシル基で置換されてよいアミノ基、ニトロ基、シアノ基、水酸基、メルカプト基及び $C_1\sim C_6$ アルキルチオ基からなる群から選ばれる同一若しくは異なった1～6個の置換基で置換されてよいアリール基」は、前記「アリール基」の他、同一若しくは異なった1～6個のハロゲン原子で置換された前記「アリール基」、同一若しくは異なった1～6個の前記「同一若しくは異なった1～3個のハロゲン原子で置換されてよい $C_1\sim C_6$ アルキル基」で置換された前記「アリール基」、同一若しくは異なった1～6個の前記「 $C_1\sim C_6$ アルコキシ基」により置換された前記「アリール基」、同一若しくは異なった1～6個の前記「同一若しくは異なった1～2個の $C_1\sim C_6$ アルキル基、又はアシル基で置換されてよいアミノ基」により置換された前記「アリール基」、1～6個のニトロ基で置換された前記「アリール基」、1～6個のシアノ基で置換された前記「アリール基」、1～6個の水酸基で置換された前記「アリール基」、1～6個のメルカプト基で置換された前記「アラルキル基」、同一若しくは異なった1～6個の前記「 $C_1\sim C_6$ アルキルチオ基」により置換された前記「アリール基」の他、ハロゲン原子、前記「同一若しくは異なった1～3個のハロゲン原子で置換されてよい $C_1\sim C_6$ アルキル基」、前記「 $C_1\sim C_6$ アルコキシ基」、前記「同一若しくは異なった1～2個の $C_1\sim C_6$ アルキル基又はアシル基で置換されてよいアミノ基」、ニトロ基、シアノ基、水酸基、メルカプト基及び前記「 $C_1\sim C_6$ アルキルチオ基」からなる群から選ばれる2種以上の置換

基により置換された前記「アリール基」も含む。

本発明において、「ハロゲン原子、同一若しくは異なった1～3個のハロゲン原子で置換されてよい $C_1\sim C_6$ アルキル基、 $C_1\sim C_6$ アルコキシ基及び水酸基からなる群から選ばれる同一若しくは異なった1～6個の置換基で置換されてよい

5 ヘテロアリール基」は、前記「ヘテロアリール基」の他、同一若しくは異なった1～6個のハロゲン原子で置換された前記「ヘテロアリール基」、同一若しくは異なった1～6個の前記「同一若しくは異なった1～3個のハロゲン原子で置換されてよい $C_1\sim C_6$ アルキル基」により置換された前記「ヘテロアリール基」、同一若しくは異なった1～6個の前記「 $C_1\sim C_6$ アルコキシ基」により置換された前記「ヘテロアリール基」、1～6個の水酸基により置換された前記「ヘテロ

10 アリール基」の他、ハロゲン原子、前記「 $C_1\sim C_6$ アルキル基」、前記「 $C_1\sim C_6$ アルコキシ基」及び水酸基からなる群から選ばれる2種以上の置換基により置換された前記「ヘテロアリール基」も含む。

本発明において、「ハロゲン原子、同一若しくは異なった1～3個のハロゲン原子で置換されてよい $C_1\sim C_6$ アルキル基、 $C_1\sim C_6$ アルコキシ基、同一若しくは異なった1～2個の $C_1\sim C_6$ アルキル基、又はアシル基で置換されてよいアミノ基、ニトロ基、シアノ基、水酸基、メルカプト基及び $C_1\sim C_6$ アルキルチオ基からなる群から選ばれる同一若しくは異なった1～6個の置換基で置換されてよいアラルキル基」は、前記「アラルキル基」の他、同一若しくは異なった1～

15 6個のハロゲン原子で置換された前記「アラルキル基」、同一若しくは異なった1～6個の前記「同一若しくは異なった1～3個のハロゲン原子で置換されてよい $C_1\sim C_6$ アルキル基」で置換された前記「アラルキル基」、同一若しくは異なった1～6個の前記「 $C_1\sim C_6$ アルコキシ基」により置換された前記「アラルキル基」、同一若しくは異なった1～6個の前記「同一若しくは異なった1～

20 2個の $C_1\sim C_6$ アルキル基、又はアシル基で置換されてよいアミノ基」により置換された前記「アラルキル基」、1～6個のニトロ基で置換された前記「アラルキル基」、1～6個のシアノ基で置換された前記「アラルキル基」、1～6個の水酸基で置換された前記「アラルキル基」、1～6個のメルカプト基で置換された前記「アラルキル基」、同一若しくは異なった1～6個の前記「 $C_1\sim C_6$ アルキ

25

ルチオ基」により置換された前記「アラルキル基」の他、ハロゲン原子、前記「同一若しくは異なった1～3個のハロゲン原子で置換されてよい $C_1\sim C_6$ アルキル基」、前記「 $C_1\sim C_6$ アルコキシ基」、前記「、又はアシ、ニトロ基、シアノ基、水酸基、メルカプト基及び前記「 $C_1\sim C_6$ アルキルチオ基」からなる群から選ばれる2種以上の置換基により置換された前記「アラルキル基」も含む。アラルキル基が置換基を有する場合、当該置換基はアラルキル基を構成するアリール環上又はアルキル基上のいずれか又は両方に置換していてもよい。

Xはイソキノリン環上の置換可能な任意の位置に1個ないし4個置換することができ、Xが2個以上存在する場合には、それらは同一でも異なってもよい。

Yはキノリン環上の置換可能な任意の位置に1個ないし6個置換することができ、Yが2個以上存在する場合には、それらは同一でも異なってもよい。

本発明の化合物(I a)、(I b)、(I c)又は(I d)において、

(1) R^1 及び R^2 は、好適には、ハロゲン原子、 $C_1\sim C_6$ アルコキシ基及びフェノキシ基からなる群から選ばれる同一若しくは異なった1～3個の置換基で置換されてよい $C_1\sim C_6$ アルキル基；又は、ハロゲン原子、 $C_1\sim C_6$ アルキル基、 $C_1\sim C_6$ アルコキシ基及び水酸基からなる群から選ばれる同一若しくは異なった1～6個の置換基で置換されてよいアリール基であり、より好適には、同一若しくは異なった1～3個のハロゲン原子で置換されてよい $C_1\sim C_6$ アルキル基、又は、同一若しくは異なった1～6個のハロゲン原子で置換されてよいフェニル基であり、更により好適には、メチル基、エチル基、プロピル基、トリフルオロメチル基、トリフルオロエチル基、フェニル基、フルオロフェニル基、クロロフェニル基であり、

(2) R^3 及び R^4 は、好適には、水素原子、ハロゲン原子、又は $C_1\sim C_6$ アルキル基であり、 R^5 は、好適には水素原子であり、

(3) X_n は、好適には、Xが、ハロゲン原子； $C_1\sim C_6$ アルキル基； $C_2\sim C_6$ アルキニル基；ハロゲン原子、同一若しくは異なった1～3個のハロゲン原子で置換されてよい $C_1\sim C_6$ アルキル基及び $C_1\sim C_6$ アルコキシ基からなる群から選ばれる同一若しくは異なった1～6個の置換基で置換されてよいアリール基；ハロゲン原子、同一若しくは異なった1～3個のハロゲン原子で置換されてよい C_1

$\sim C_6$ アルキル基及び $C_1 \sim C_6$ アルコキシ基からなる群から選ばれる同一若しくは異なった 1～6 個の置換基で置換されてよいヘテロアリール基；シアノ基；又は、 $C_1 \sim C_6$ アルキル基及びフェニル基からなる群から選ばれる置換基で水酸基の水素原子が置換されてよい N-ヒドロキシアルカンイミドイル基であり、 n が、0～2 の整数であり、より好適には、 X が、ハロゲン原子； $C_1 \sim C_6$ アルキル基； $C_1 \sim C_6$ アルキニル基；ハロゲン原子、同一若しくは異なった 1～3 個のハロゲン原子で置換されてよい $C_1 \sim C_6$ アルキル基及び $C_1 \sim C_6$ アルコキシ基からなる群から選ばれる同一若しくは異なった 1～6 個の置換基で置換されてよいヘテロアリール基；シアノ基；又は、 $C_1 \sim C_6$ アルキル基及びフェニル基からなる群から選ばれる置換基で水酸基の水素原子が置換されてよい N-ヒドロキシアルカンイミドイル基であり、 n が、0～2 の整数であり、更により好適には、 X が、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、メチル基、エチニル基、フリル基、チエニル基、シアノ基、メトキシエタンイミドイル基、エトキシエタンイミドイル基又はフェノキシエタンイミドイル基であり、 n が、0 又は 1 であり、

(4) Y_m は、好適には、 Y が、フッ素原子、塩素原子又はメチル基であり、 m が、0 又は 1 であり、より好適には、 Y が、メチル基であり、 m が、0 又は 1 である。

本発明の化合物 (I a)、(I b)、(I c) 又は (I d) において、好適には、

(a 1) R^1 及び R^2 は、ハロゲン原子、 $C_1 \sim C_6$ アルコキシ基及びフェノキシ基からなる群から選ばれる同一若しくは異なった 1～3 個の置換基で置換されてよい $C_1 \sim C_6$ アルキル基；又は、ハロゲン原子、 $C_1 \sim C_6$ アルキル基、 $C_1 \sim C_6$ アルコキシ基及び水酸基からなる群から選ばれる同一若しくは異なった 1～6 個の置換基で置換されてよいアリール基であり、

(a 2) R^3 及び R^4 は、水素原子、ハロゲン原子、又は $C_1 \sim C_6$ アルキル基であり、 R^5 は、水素原子であり、

(a 3) X_n は、 X が、ハロゲン原子； $C_1 \sim C_6$ アルキル基；ハロゲン原子、同一若しくは異なった 1～3 個のハロゲン原子で置換されてよい $C_1 \sim C_6$ アルキル基及び $C_1 \sim C_6$ アルコキシ基からなる群から選ばれる同一若しくは異なった 1～6 個の置換基で置換されてよいアリール基；ハロゲン原子、同一若しくは異なっ

た1～3個のハロゲン原子で置換されてよい $C_1\sim C_6$ アルキル基及び及び $C_1\sim C_6$ アルコキシ基からなる群から選ばれる同一若しくは異なった1～6個の置換基で置換されてよいヘテロアリール基；シアノ基；又は、 $C_1\sim C_6$ アルキル基及びフェニル基からなる群から選ばれる置換基で水酸基の水素原子が置換されてよいN-ヒドロキシアルカンイミドイル基であり、nが、0～2の整数であり、

(a 4) Y_m は、Yが、フッ素原子、塩素原子又はメチル基であり、mが、0又は1であり、

より好適には、

(b 1) R^1 及び R^2 は、同一若しくは異なった1～3個のハロゲン原子で置換されてよい $C_1\sim C_6$ アルキル基、又は、同一若しくは異なった1～6個のハロゲン原子で置換されてよいフェニル基であり、

(b 2) R^3 及び R^4 は、ハロゲン原子、又は $C_1\sim C_6$ アルキル基であり、 R^5 は、水素原子であり、

(b 3) X_n は、Xが、ハロゲン原子； $C_1\sim C_6$ アルキル基； $C_2\sim C_6$ アルキニル基；ハロゲン原子、同一若しくは異なった1～3個のハロゲン原子で置換されてよい $C_1\sim C_6$ アルキル基及び $C_1\sim C_6$ アルコキシ基からなる群から選ばれる同一若しくは異なった1～6個の置換基で置換されてよいヘテロアリール基；シアノ基；又は、 $C_1\sim C_6$ アルキル基及びフェニル基からなる群から選ばれる置換基で水酸基の水素原子が置換されてよいN-ヒドロキシアルカンイミドイル基であり、nが、0～2の整数であり、

(b 4) Y_m は、Yが、フッ素原子、塩素原子又はメチル基であり、mが、0又は1であり、

更により好適には、

(c 1) R^1 及び R^2 は、メチル基、エチル基、プロピル基、トリフルオロメチル基、トリフルオロエチル基、フェニル基、フルオロフェニル基又はクロロフェニル基であり、

(c 2) R^3 及び R^4 は、フッ素原子、又はメチル基であり、 R^5 は、水素原子であり、

(c 3) X_n は、Xが、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、メチル基、エチニル

基、フリル基、チエニル基、シアノ基、メトキシエタンイミドイル基、エトキシエタンイミドイル基又はフェノキシエタンイミドイル基であり、nが、0又は1であり、

(c 4) Y_mは、Yが、メチル基であり、mが、0又は1であり、

5 最も好適には、

(d) 化合物 (I a)、(I b)、(I c) 又は (I d) が、

3-(5-フルオロ-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン、

10 3-(5-クロロ-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン、

3-(5-プロモ-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン、

3-(5-エチニル-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン、

15 3-(5, 6-ジフルオロ-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン、

3-(3-エチル-5-フルオロ-3-メチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン、

20 3-(5-フルオロ-3-メチル-3-プロピル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン、

3-(3-メチル-3-トリフルオロメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン、

3-[3-メチル-3-(2, 2, 2-トリフルオロエチル)-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル]キノリン、

25 3-(3-メチル-3-フェニル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン、

3-[3-メチル-3-(4-フルオロフェニル)-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル]キノリン、

3-[3-メチル-3-(4-クロロフェニル)-3, 4-ジヒドロイソキノリ

ン-1-イル]キノリン、

3-(5-フルオロ-3, 3, 4, 4-テトラメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)-6-フルオロキノリン、

5 3-(5-フルオロ-3, 3, 4, 4-テトラメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)-8-フルオロキノリン、

3-(5-フルオロ-3, 3, 4, 4-テトラメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)-8-メチルキノリン、

3-(4, 5-ジフルオロ-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン、

10 3-(4, 4-ジフルオロ-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン、

3-(4, 4, 5-トリフルオロ-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン、

15 5-フルオロ-3, 3, 4, 4-テトラメチル-8b-キノリン-3-イル-4, 8b-ジヒドロ-3H-オキサジレノ[3, 2-a]イソキノリン、

3, 3, 4, 4-テトラメチル-8b-キノリン-3-イル-4, 8b-ジヒドロ-3H-オキサジレノ[3, 2-a]イソキノリン、

5-フルオロ-3, 3-ジメチル-8b-キノリン-3-イル-4, 8b-ジヒドロ-3H-オキサジレノ[3, 2-a]イソキノリン、

20 6-フルオロ-3, 3, 4, 4-テトラメチル-8b-キノリン-3-イル-4, 8b-ジヒドロ-3H-オキサジレノ[3, 2-a]イソキノリン、

4', 4'-ジメチル-8b'-キノリン-3-イル-4', 8b'-ジヒドロスピロ[シクロペンタン-1, 3'-オキサジレノ[3, 2-a]イソキノリン]、

25 4, 4, 5-トリフルオロ-3, 3-ジメチル-8b-キノリン-3-イル-4, 8b-ジヒドロ-3H-オキサジレノ[3, 2-a]イソキノリン、

3-(5-フルオロ-3, 3, 4, 4-テトラメチル-2-オキシド-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン、

3-(3, 3, 4, 4-テトラメチル-2-オキシド-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン、

3- (6-フルオロ-3, 3, 4, 4-テトラメチル-2-オキシド-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン、

3- (6-クロロ-3, 3, 4, 4-テトラメチル-2-オキシド-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン、

5 3- (4, 4-ジフルオロ-3, 3-ジメチル-2-オキシド-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン、

3- (4, 4, 5-トリフルオロ-3, 3-ジメチル-2-オキシド-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン又は

10 3- (5-フルオロ-3, 3, 4, 4-テトラメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリンである。

本発明の化合物 (I a)、(I b)、(I c) 又は (I d) は、例えば、硫酸塩、塩酸塩、硝酸塩、リン酸塩のような塩にすることができる。それらの塩は、農園芸用の殺菌剤として使用できる限り、本発明に包含される。

15 本発明の化合物 (I a)、(I b)、(I c) 又は (I d) 及びそれらの塩は溶媒和物にすることができ、それら溶媒和物も、本発明に包含される。そのような溶媒和物は、好適には、水和物である。

本発明の化合物 (I a)、(I b)、(I c) 又は (I d) 中には、不斉炭素を有する化合物もあり、その場合には、本願発明は、一種の光学活性体及び数種の光学活性体の任意の割合の混合物をも包含する。

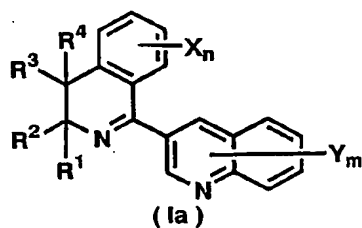
20 本発明の代表化合物を下記表に例示するが、本発明はこれらの化合物に限定されるものではない。

以下、「Me」はメチル基を、「Et」はエチル基を、「Pr」はプロピル基を、「iPr」はイソプロピル基を、「Bu」はブチル基を、「iBu」はイソブチル基を、「tBu」はtブチル基を、「iPen」はイソペンチル基を、「Vinyl」は、ビニル基を、「Allyl」は、アリル基を、「Ethynyl」はエチニル基を、「Ph」はフェニル基を、「FUR」はフリル基を、「2THI」は2-チエニル基を、「OXA」はオキサゾリル基を、「Ac」はアセチル基を、「EtIMD」はN-ヒドロキシエタンイミドイル基を、「3PYD」は3-ピリジル基を、「Bn」はベンジル基を、「cPen」はR¹とR²または、R³とR

25

⁴とで環を形成してシクロペンチル基を、「cHex」は、R¹とR²または、R³とR⁴とで環を形成してシクロヘキシル基を、「cHep」は、R¹とR²または、R³とR⁴とで環を形成してシクロヘプチル基を、「X_n」および「Y_m」において「H」はn=0およびm=0を、それぞれ示す。

表 1



| 化合物番号 | R1, R2 | R3, R4 | Xn | Ym |
|-------|--------|--------|-----|-------|
| 1-1 | Me, Me | H, H | H | H |
| 1-2 | Me, Me | H, H | H | 2-F |
| 1-3 | Me, Me | H, H | H | 4-F |
| 1-4 | Me, Me | H, H | H | 5-F |
| 1-5 | Me, Me | H, H | H | 6-F |
| 1-6 | Me, Me | H, H | H | 7-F |
| 1-7 | Me, Me | H, H | H | 8-F |
| 1-8 | Me, Me | H, H | H | 2-Cl |
| 1-9 | Me, Me | H, H | H | 4-Cl |
| 1-10 | Me, Me | H, H | H | 5-Cl |
| 1-11 | Me, Me | H, H | H | 6-Cl |
| 1-12 | Me, Me | H, H | H | 7-Cl |
| 1-13 | Me, Me | H, H | H | 8-Cl |
| 1-14 | Me, Me | H, H | H | 2-Me |
| 1-15 | Me, Me | H, H | H | 4-Me |
| 1-16 | Me, Me | H, H | H | 5-Me |
| 1-17 | Me, Me | H, H | H | 6-Me |
| 1-18 | Me, Me | H, H | H | 7-Me |
| 1-19 | Me, Me | H, H | H | 8-Me |
| 1-20 | Me, Me | H, H | H | 2-MeO |
| 1-21 | Me, Me | H, H | H | 4-MeO |
| 1-22 | Me, Me | H, H | H | 5-MeO |
| 1-23 | Me, Me | H, H | H | 6-MeO |
| 1-24 | Me, Me | H, H | H | 7-MeO |
| 1-25 | Me, Me | H, H | H | 8-MeO |
| 1-26 | Me, Me | H, H | H | 2-OH |
| 1-27 | Me, Me | H, H | H | 4-OH |
| 1-28 | Me, Me | H, H | H | 5-OH |
| 1-29 | Me, Me | H, H | H | 6-OH |
| 1-30 | Me, Me | H, H | H | 7-OH |
| 1-31 | Me, Me | H, H | H | 8-OH |
| 1-32 | Me, Me | H, H | 5-F | H |
| 1-33 | Me, Me | H, H | 5-F | 4-F |
| 1-34 | Me, Me | H, H | 5-F | 8-F |
| 1-35 | Me, Me | H, H | 5-F | 4-Cl |

| | | | | |
|------|--------|------|------|-------|
| 1-36 | Me, Me | H, H | 5-F | 6-Cl |
| 1-37 | Me, Me | H, H | 5-F | 4-MeO |
| 1-38 | Me, Me | H, H | 5-F | 8-Me |
| 1-39 | Me, Me | H, H | 5-F | 8-MeO |
| 1-40 | Me, Me | H, H | 5-F | 8-OH |
| 1-41 | Me, Me | H, H | 6-F | H |
| 1-42 | Me, Me | H, H | 7-F | H |
| 1-43 | Me, Me | H, H | 8-F | H |
| 1-44 | Me, Me | H, H | 5-Cl | H |
| 1-45 | Me, Me | H, H | 5-Cl | 4-F |
| 1-46 | Me, Me | H, H | 5-Cl | 8-F |
| 1-47 | Me, Me | H, H | 5-Cl | 4-Cl |
| 1-48 | Me, Me | H, H | 5-Cl | 6-Cl |
| 1-49 | Me, Me | H, H | 5-Cl | 4-Me |
| 1-50 | Me, Me | H, H | 5-Cl | 8-Me |
| 1-51 | Me, Me | H, H | 5-Cl | 8-MeO |
| 1-52 | Me, Me | H, H | 5-Cl | 8-OH |
| 1-53 | Me, Me | H, H | 6-Cl | H |
| 1-54 | Me, Me | H, H | 7-Cl | H |
| 1-55 | Me, Me | H, H | 8-Cl | H |
| 1-56 | Me, Me | H, H | 5-Br | H |
| 1-57 | Me, Me | H, H | 5-Br | 4-F |
| 1-58 | Me, Me | H, H | 5-Br | 8-F |
| 1-59 | Me, Me | H, H | 5-Br | 4-Cl |
| 1-60 | Me, Me | H, H | 5-Br | 6-Cl |
| 1-61 | Me, Me | H, H | 5-Br | 4-Me |
| 1-62 | Me, Me | H, H | 5-Br | 8-Me |
| 1-63 | Me, Me | H, H | 5-Br | 8-MeO |
| 1-64 | Me, Me | H, H | 5-Br | 8-OH |
| 1-65 | Me, Me | H, H | 6-Br | H |
| 1-66 | Me, Me | H, H | 7-Br | H |
| 1-67 | Me, Me | H, H | 8-Br | H |
| 1-68 | Me, Me | H, H | 5-I | H |
| 1-69 | Me, Me | H, H | 5-Me | H |
| 1-70 | Me, Me | H, H | 6-Me | H |
| 1-71 | Me, Me | H, H | 7-Me | H |
| 1-72 | Me, Me | H, H | 8-Me | H |
| 1-73 | Me, Me | H, H | 5-Et | H |
| 1-74 | Me, Me | H, H | 6-Et | H |
| 1-75 | Me, Me | H, H | 7-Et | H |
| 1-76 | Me, Me | H, H | 8-Et | H |
| 1-77 | Me, Me | H, H | 5-Pr | H |
| 1-78 | Me, Me | H, H | 6-Pr | H |

| | | | | |
|-------|--------|------|--------------------|------|
| 1-79 | Me, Me | H, H | 7-Pr | H |
| 1-80 | Me, Me | H, H | 8-Pr | H |
| 1-81 | Me, Me | H, H | 5-Vinyl | H |
| 1-82 | Me, Me | H, H | 6-Vinyl | H |
| 1-83 | Me, Me | H, H | 7-Vinyl | H |
| 1-84 | Me, Me | H, H | 8-Vinyl | H |
| 1-85 | Me, Me | H, H | 5-Etynyl | H |
| 1-86 | Me, Me | H, H | 6-Etynyl | H |
| 1-87 | Me, Me | H, H | 7-Etynyl | H |
| 1-88 | Me, Me | H, H | 8-Etynyl | H |
| 1-89 | Me, Me | H, H | 5-Ph | H |
| 1-90 | Me, Me | H, H | 6-Ph | H |
| 1-91 | Me, Me | H, H | 7-Ph | H |
| 1-92 | Me, Me | H, H | 8-Ph | H |
| 1-93 | Me, Me | H, H | 5-FUR | H |
| 1-94 | Me, Me | H, H | 5-2THI | H |
| 1-95 | Me, Me | H, H | 5-3THI | H |
| 1-96 | Me, Me | H, H | 5-(2-Cl-2THI) | H |
| 1-97 | Me, Me | H, H | OXA | H |
| 1-98 | Me, Me | H, H | 5-HEtIMD | H |
| 1-99 | Me, Me | H, H | 5-MeMeIMD | H |
| 1-100 | Me, Me | H, H | 5-MeEtIMD | H |
| 1-101 | Me, Me | H, H | 5-EtEtIMD | H |
| 1-102 | Me, Me | H, H | 5-PrEtIMD | H |
| 1-103 | Me, Me | H, H | 5-tBulEtIMD | H |
| 1-104 | Me, Me | H, H | 5-AllylEtIMD | H |
| 1-105 | Me, Me | H, H | 5-BnEtIMD | H |
| 1-106 | Me, Me | H, H | 5-PhEtIMD | H |
| 1-107 | Me, Me | H, H | 5-MeO | H |
| 1-108 | Me, Me | H, H | 6-MeO | H |
| 1-109 | Me, Me | H, H | 7-MeO | H |
| 1-110 | Me, Me | H, H | 8-MeO | H |
| 1-111 | Me, Me | H, H | 5-NH ₂ | H |
| 1-112 | Me, Me | H, H | 5-NHAc | H |
| 1-113 | Me, Me | H, H | 5-CHO | H |
| 1-114 | Me, Me | H, H | 5-Ac | H |
| 1-115 | Me, Me | H, H | 5-CONHMe | H |
| 1-116 | Me, Me | H, H | 5-CN | H |
| 1-117 | Me, Me | H, H | 5,6-F ₂ | H |
| 1-118 | Me, Me | H, H | 5,6-F ₂ | 4-F |
| 1-119 | Me, Me | H, H | 5,6-F ₂ | 8-F |
| 1-120 | Me, Me | H, H | 5,6-F ₂ | 4-Cl |
| 1-121 | Me, Me | H, H | 5,6-F ₂ | 6-Cl |

| | | | | |
|-------|--------|------|---------------|-------|
| 1-122 | Me, Me | H, H | 5,6-F2 | 4-Me |
| 1-123 | Me, Me | H, H | 5,6-F2 | 8-Me |
| 1-124 | Me, Me | H, H | 5,6-F2 | 8-MeO |
| 1-125 | Me, Me | H, H | 5,6-F2 | 8-OH |
| 1-126 | Me, Me | H, H | 5,6-Cl2 | H |
| 1-127 | Me, Me | H, H | 5,6-Cl2 | 4-F |
| 1-128 | Me, Me | H, H | 5,6-Cl2 | 8-F |
| 1-129 | Me, Me | H, H | 5,6-Cl2 | 4-Cl |
| 1-130 | Me, Me | H, H | 5,6-Cl2 | 6-Cl |
| 1-131 | Me, Me | H, H | 5,6-Cl2 | 4-Me |
| 1-132 | Me, Me | H, H | 5,6-Cl2 | 8-Me |
| 1-133 | Me, Me | H, H | 5,6-Cl2 | 8-MeO |
| 1-134 | Me, Me | H, H | 5,6-Cl2 | 8-OH |
| 1-135 | Me, Me | H, H | 5-F,7-Me | H |
| 1-136 | Me, Me | H, H | 6-F,7-Me | H |
| 1-137 | Me, Et | H, H | H | H |
| 1-138 | Me, Et | H, H | H | 4-F |
| 1-139 | Me, Et | H, H | H | 8-F |
| 1-140 | Me, Et | H, H | H | 4-Cl |
| 1-141 | Me, Et | H, H | H | 6-Cl |
| 1-142 | Me, Et | H, H | H | 8-Cl |
| 1-143 | Me, Et | H, H | H | 4-Me |
| 1-144 | Me, Et | H, H | H | 8-Me |
| 1-145 | Me, Et | H, H | H | 8-MeO |
| 1-146 | Me, Et | H, H | H | 8-OH |
| 1-147 | Me, Et | H, H | 5-F | H |
| 1-148 | Me, Et | H, H | 6-F | H |
| 1-149 | Me, Et | H, H | 7-F | H |
| 1-150 | Me, Et | H, H | 5-Cl | H |
| 1-151 | Me, Et | H, H | 6-Cl | H |
| 1-152 | Me, Et | H, H | 7-Cl | H |
| 1-153 | Me, Et | H, H | 5-Br | H |
| 1-154 | Me, Et | H, H | 6-Br | H |
| 1-155 | Me, Et | H, H | 7-Br | H |
| 1-156 | Me, Et | H, H | 5-I | H |
| 1-157 | Me, Et | H, H | 5-Me | H |
| 1-158 | Me, Et | H, H | 5-Vinyl | H |
| 1-159 | Me, Et | H, H | 5-Etynyl | H |
| 1-160 | Me, Et | H, H | 5-Ph | H |
| 1-161 | Me, Et | H, H | 5-FUR | H |
| 1-162 | Me, Et | H, H | 5-2THI | H |
| 1-163 | Me, Et | H, H | 5-3THI | H |
| 1-164 | Me, Et | H, H | 5-(2-Cl-2THI) | H |

| | | | | |
|-------|--------|------|---------------|-------|
| 1-165 | Me, Et | H, H | OXA | H |
| 1-166 | Me, Et | H, H | 5-MeMeIMD | H |
| 1-167 | Me, Et | H, H | 5-MeEtIMD | H |
| 1-168 | Me, Et | H, H | 5-EtEtIMD | H |
| 1-169 | Me, Et | H, H | 5-AllylEtIMD | H |
| 1-170 | Me, Et | H, H | 5-BnEtIMD | H |
| 1-171 | Me, Et | H, H | 5-PhEtIMD | H |
| 1-172 | Me, Et | H, H | 5-CN | H |
| 1-173 | Me, Et | H, H | 5,6-F2 | H |
| 1-174 | Me, Et | H, H | 5,6-Cl2 | H |
| 1-175 | Me, Pr | H, H | H | H |
| 1-176 | Me, Pr | H, H | H | 4-F |
| 1-177 | Me, Pr | H, H | H | 8-F |
| 1-178 | Me, Pr | H, H | H | 4-Cl |
| 1-179 | Me, Pr | H, H | H | 6-Cl |
| 1-180 | Me, Pr | H, H | H | 8-Cl |
| 1-181 | Me, Pr | H, H | H | 4-Me |
| 1-182 | Me, Pr | H, H | H | 8-Me |
| 1-183 | Me, Pr | H, H | H | 8-MeO |
| 1-184 | Me, Pr | H, H | H | 8-OH |
| 1-185 | Me, Pr | H, H | 5-F | H |
| 1-186 | Me, Pr | H, H | 6-F | H |
| 1-187 | Me, Pr | H, H | 7-F | H |
| 1-188 | Me, Pr | H, H | 5-Cl | H |
| 1-189 | Me, Pr | H, H | 6-Cl | H |
| 1-190 | Me, Pr | H, H | 7-Cl | H |
| 1-191 | Me, Pr | H, H | 5-Br | H |
| 1-192 | Me, Pr | H, H | 6-Br | H |
| 1-193 | Me, Pr | H, H | 7-Br | H |
| 1-194 | Me, Pr | H, H | 5-I | H |
| 1-195 | Me, Pr | H, H | 5-Me | H |
| 1-196 | Me, Pr | H, H | 5-Vinyl | H |
| 1-197 | Me, Pr | H, H | 5-Etynyl | H |
| 1-198 | Me, Pr | H, H | 5-Ph | H |
| 1-199 | Me, Pr | H, H | 5-FUR | H |
| 1-200 | Me, Pr | H, H | 5-2THI | H |
| 1-201 | Me, Pr | H, H | 5-3THI | H |
| 1-202 | Me, Pr | H, H | 5-(2-Cl-2THI) | H |
| 1-203 | Me, Pr | H, H | OXA | H |
| 1-204 | Me, Pr | H, H | 5-MeMeIMD | H |
| 1-205 | Me, Pr | H, H | 5-MeEtIMD | H |
| 1-206 | Me, Pr | H, H | 5-EtEtIMD | H |
| 1-207 | Me, Pr | H, H | 5-AllylEtIMD | H |

| | | | | |
|-------|---------|------|---------------|-------|
| 1-208 | Me, Pr | H, H | 5-BnEtIMD | H |
| 1-209 | Me, Pr | H, H | 5-PhEtIMD | H |
| 1-210 | Me, Pr | H, H | 5-CN | H |
| 1-211 | Me, Pr | H, H | 5,6-F2 | H |
| 1-212 | Me, Pr | H, H | 5,6-Cl2 | H |
| 1-213 | Me, iPr | H, H | H | H |
| 1-214 | Me, iPr | H, H | H | 4-F |
| 1-215 | Me, iPr | H, H | H | 8-F |
| 1-216 | Me, iPr | H, H | H | 4-Cl |
| 1-217 | Me, iPr | H, H | H | 6-Cl |
| 1-218 | Me, iPr | H, H | H | 8-Cl |
| 1-219 | Me, iPr | H, H | H | 4-Me |
| 1-220 | Me, iPr | H, H | H | 8-Me |
| 1-221 | Me, iPr | H, H | H | 8-MeO |
| 1-222 | Me, iPr | H, H | H | 8-OH |
| 1-223 | Me, iPr | H, H | 5-F | H |
| 1-224 | Me, iPr | H, H | 6-F | H |
| 1-225 | Me, iPr | H, H | 7-F | H |
| 1-226 | Me, iPr | H, H | 5-Cl | H |
| 1-227 | Me, iPr | H, H | 6-Cl | H |
| 1-228 | Me, iPr | H, H | 7-Cl | H |
| 1-229 | Me, iPr | H, H | 5-Br | H |
| 1-230 | Me, iPr | H, H | 6-Br | H |
| 1-231 | Me, iPr | H, H | 7-Br | H |
| 1-232 | Me, iPr | H, H | 5-I | H |
| 1-233 | Me, iPr | H, H | 5-Me | H |
| 1-234 | Me, iPr | H, H | 5-Vinyl | H |
| 1-235 | Me, iPr | H, H | 5-Etynyl | H |
| 1-236 | Me, iPr | H, H | 5-Ph | H |
| 1-237 | Me, iPr | H, H | 5-FUR | H |
| 1-238 | Me, iPr | H, H | 5-2THI | H |
| 1-239 | Me, iPr | H, H | 5-3THI | H |
| 1-240 | Me, iPr | H, H | 5-(2-Cl-2THI) | H |
| 1-241 | Me, iPr | H, H | OXA | H |
| 1-242 | Me, iPr | H, H | 5-MeMeIMD | H |
| 1-243 | Me, iPr | H, H | 5-MeEtIMD | H |
| 1-244 | Me, iPr | H, H | 5-EtEtIMD | H |
| 1-245 | Me, iPr | H, H | 5-AllylEtIMD | H |
| 1-246 | Me, iPr | H, H | 5-BnEtIMD | H |
| 1-247 | Me, iPr | H, H | 5-PhEtIMD | H |
| 1-248 | Me, iPr | H, H | 5-CN | H |
| 1-249 | Me, iPr | H, H | 5,6-F2 | H |
| 1-250 | Me, iPr | H, H | 5,6-Cl2 | H |

| | | | | |
|-------|---------|------|---------------|-------|
| 1-251 | Me, iBu | H, H | H | H |
| 1-252 | Me, iBu | H, H | H | 4-F |
| 1-253 | Me, iBu | H, H | H | 8-F |
| 1-254 | Me, iBu | H, H | H | 4-Cl |
| 1-255 | Me, iBu | H, H | H | 6-Cl |
| 1-256 | Me, iBu | H, H | H | 8-Cl |
| 1-257 | Me, iBu | H, H | H | 4-Me |
| 1-258 | Me, iBu | H, H | H | 8-Me |
| 1-259 | Me, iBu | H, H | H | 8-MeO |
| 1-260 | Me, iBu | H, H | H | 8-OH |
| 1-261 | Me, iBu | H, H | 5-F | H |
| 1-262 | Me, iBu | H, H | 6-F | H |
| 1-263 | Me, iBu | H, H | 7-F | H |
| 1-264 | Me, iBu | H, H | 5-Cl | H |
| 1-265 | Me, iBu | H, H | 6-Cl | H |
| 1-266 | Me, iBu | H, H | 7-Cl | H |
| 1-267 | Me, iBu | H, H | 5-Br | H |
| 1-268 | Me, iBu | H, H | 6-Br | H |
| 1-269 | Me, iBu | H, H | 7-Br | H |
| 1-270 | Me, iBu | H, H | 5-I | H |
| 1-271 | Me, iBu | H, H | 5-Me | H |
| 1-272 | Me, iBu | H, H | 5-Vinyl | H |
| 1-273 | Me, iBu | H, H | 5-Etynyl | H |
| 1-274 | Me, iBu | H, H | 5-Ph | H |
| 1-275 | Me, iBu | H, H | 5-FUR | H |
| 1-276 | Me, iBu | H, H | 5-2THI | H |
| 1-277 | Me, iBu | H, H | 5-3THI | H |
| 1-278 | Me, iBu | H, H | 5-(2-Cl-2THI) | H |
| 1-279 | Me, iBu | H, H | OXA | H |
| 1-280 | Me, iBu | H, H | 5-MeMeIMD | H |
| 1-281 | Me, iBu | H, H | 5-MeEtIMD | H |
| 1-282 | Me, iBu | H, H | 5-EtEtIMD | H |
| 1-283 | Me, iBu | H, H | 5-AllylEtIMD | H |
| 1-284 | Me, iBu | H, H | 5-BnEtIMD | H |
| 1-285 | Me, iBu | H, H | 5-PhEtIMD | H |
| 1-286 | Me, iBu | H, H | 5-CN | H |
| 1-287 | Me, iBu | H, H | 5,6-F2 | H |
| 1-288 | Me, iBu | H, H | 5,6-Cl2 | H |
| 1-289 | Me, tBu | H, H | H | H |
| 1-290 | Me, tBu | H, H | 5-F | H |
| 1-291 | Me, tBu | H, H | 5-Cl | H |
| 1-292 | Me, tBu | H, H | 5-Br | H |
| 1-293 | Me, tBu | H, H | 5-I | H |

| | | | | |
|-------|----------|------|---------------|-------|
| 1-294 | Me, tBu | H, H | 5-Me | H |
| 1-295 | Me, tBu | H, H | 5-Vinyl | H |
| 1-296 | Me, tBu | H, H | 5-Etynyl | H |
| 1-297 | Me, tBu | H, H | 5-Ph | H |
| 1-298 | Me, tBu | H, H | 5-FUR | H |
| 1-299 | Me, tBu | H, H | 5-2THI | H |
| 1-300 | Me, tBu | H, H | 5-3THI | H |
| 1-301 | Me, tBu | H, H | 5-MeEtIMD | H |
| 1-302 | Me, tBu | H, H | 5-EtEtIMD | H |
| 1-303 | Me, tBu | H, H | 5-PhEtIMD | H |
| 1-304 | Me, tBu | H, H | 5-CN | H |
| 1-305 | Me, tBu | H, H | 5,6-F2 | H |
| 1-306 | Me, tBu | H, H | 5,6-Cl2 | H |
| 1-307 | Me, iPen | H, H | H | H |
| 1-308 | Me, iPen | H, H | H | 4-F |
| 1-309 | Me, iPen | H, H | H | 8-F |
| 1-310 | Me, iPen | H, H | H | 4-Cl |
| 1-311 | Me, iPen | H, H | H | 6-Cl |
| 1-312 | Me, iPen | H, H | H | 8-Cl |
| 1-313 | Me, iPen | H, H | H | 4-Me |
| 1-314 | Me, iPen | H, H | H | 8-Me |
| 1-315 | Me, iPen | H, H | H | 8-MeO |
| 1-316 | Me, iPen | H, H | H | 8-OH |
| 1-317 | Me, iPen | H, H | 5-F | H |
| 1-318 | Me, iPen | H, H | 6-F | H |
| 1-319 | Me, iPen | H, H | 7-F | H |
| 1-320 | Me, iPen | H, H | 5-Cl | H |
| 1-321 | Me, iPen | H, H | 6-Cl | H |
| 1-322 | Me, iPen | H, H | 7-Cl | H |
| 1-323 | Me, iPen | H, H | 5-Br | H |
| 1-324 | Me, iPen | H, H | 6-Br | H |
| 1-325 | Me, iPen | H, H | 7-Br | H |
| 1-326 | Me, iPen | H, H | 5-I | H |
| 1-327 | Me, iPen | H, H | 5-Me | H |
| 1-328 | Me, iPen | H, H | 5-Vinyl | H |
| 1-329 | Me, iPen | H, H | 5-Etynyl | H |
| 1-330 | Me, iPen | H, H | 5-Ph | H |
| 1-331 | Me, iPen | H, H | 5-FUR | H |
| 1-332 | Me, iPen | H, H | 5-2THI | H |
| 1-333 | Me, iPen | H, H | 5-3THI | H |
| 1-334 | Me, iPen | H, H | 5-(2-Cl-2THI) | H |
| 1-335 | Me, iPen | H, H | OXA | H |
| 1-336 | Me, iPen | H, H | 5-MeMeIMD | H |

| | | | | |
|-------|----------|------|---------------|-------|
| 1-337 | Me, iPen | H, H | 5-MeEtIMD | H |
| 1-338 | Me, iPen | H, H | 5-EtEtIMD | H |
| 1-339 | Me, iPen | H, H | 5-AllylEtIMD | H |
| 1-340 | Me, iPen | H, H | 5-BnEtIMD | H |
| 1-341 | Me, iPen | H, H | 5-PhEtIMD | H |
| 1-342 | Me, iPen | H, H | 5-CN | H |
| 1-343 | Me, iPen | H, H | 5,6-F2 | H |
| 1-344 | Me, iPen | H, H | 5,6-Cl2 | H |
| 1-345 | Et, Et | H, H | H | H |
| 1-346 | Et, Et | H, H | H | 4-F |
| 1-347 | Et, Et | H, H | H | 8-F |
| 1-348 | Et, Et | H, H | H | 4-Cl |
| 1-349 | Et, Et | H, H | H | 6-Cl |
| 1-350 | Et, Et | H, H | H | 8-Cl |
| 1-351 | Et, Et | H, H | H | 4-Me |
| 1-352 | Et, Et | H, H | H | 8-Me |
| 1-353 | Et, Et | H, H | H | 8-MeO |
| 1-354 | Et, Et | H, H | H | 8-OH |
| 1-355 | Et, Et | H, H | 5-F | H |
| 1-356 | Et, Et | H, H | 6-F | H |
| 1-357 | Et, Et | H, H | 7-F | H |
| 1-358 | Et, Et | H, H | 5-Cl | H |
| 1-359 | Et, Et | H, H | 6-Cl | H |
| 1-360 | Et, Et | H, H | 7-Cl | H |
| 1-361 | Et, Et | H, H | 5-Br | H |
| 1-362 | Et, Et | H, H | 6-Br | H |
| 1-363 | Et, Et | H, H | 7-Br | H |
| 1-364 | Et, Et | H, H | 5-I | H |
| 1-365 | Et, Et | H, H | 5-Me | H |
| 1-366 | Et, Et | H, H | 5-Vinyl | H |
| 1-367 | Et, Et | H, H | 5-Etynyl | H |
| 1-368 | Et, Et | H, H | 5-Ph | H |
| 1-369 | Et, Et | H, H | 5-FUR | H |
| 1-370 | Et, Et | H, H | 5-2THI | H |
| 1-371 | Et, Et | H, H | 5-3THI | H |
| 1-372 | Et, Et | H, H | 5-(2-Cl-2THI) | H |
| 1-373 | Et, Et | H, H | OXA | H |
| 1-374 | Et, Et | H, H | 5-MeMeIMD | H |
| 1-375 | Et, Et | H, H | 5-MeEtIMD | H |
| 1-376 | Et, Et | H, H | 5-EtEtIMD | H |
| 1-377 | Et, Et | H, H | 5-AllylEtIMD | H |
| 1-378 | Et, Et | H, H | 5-BnEtIMD | H |
| 1-379 | Et, Et | H, H | 5-PhEtIMD | H |

| | | | | |
|-------|-----------|------|---------------|-------|
| 1-380 | Et, Et | H, H | 5-CN | H |
| 1-381 | Et, Et | H, H | 5,6-F2 | H |
| 1-382 | Et, Et | H, H | 5,6-Cl2 | H |
| 1-383 | Et, iBu | H, H | H | H |
| 1-384 | Pr, Pr | H, H | H | H |
| 1-385 | Me, ClCH2 | H, H | H | H |
| 1-386 | Me, Cl2CH | H, H | H | H |
| 1-387 | Me, CF3 | H, H | H | H |
| 1-388 | Me, CF3 | H, H | H | 4-F |
| 1-389 | Me, CF3 | H, H | H | 8-F |
| 1-390 | Me, CF3 | H, H | H | 4-Cl |
| 1-391 | Me, CF3 | H, H | H | 6-Cl |
| 1-392 | Me, CF3 | H, H | H | 8-Cl |
| 1-393 | Me, CF3 | H, H | H | 4-Me |
| 1-394 | Me, CF3 | H, H | H | 8-Me |
| 1-395 | Me, CF3 | H, H | H | 8-MeO |
| 1-396 | Me, CF3 | H, H | H | 8-OH |
| 1-397 | Me, CF3 | H, H | 5-F | H |
| 1-398 | Me, CF3 | H, H | 6-F | H |
| 1-399 | Me, CF3 | H, H | 7-F | H |
| 1-400 | Me, CF3 | H, H | 5-Cl | H |
| 1-401 | Me, CF3 | H, H | 6-Cl | H |
| 1-402 | Me, CF3 | H, H | 7-Cl | H |
| 1-403 | Me, CF3 | H, H | 5-Br | H |
| 1-404 | Me, CF3 | H, H | 6-Br | H |
| 1-405 | Me, CF3 | H, H | 7-Br | H |
| 1-406 | Me, CF3 | H, H | 5-I | H |
| 1-407 | Me, CF3 | H, H | 5-Me | H |
| 1-408 | Me, CF3 | H, H | 5-Vinyl | H |
| 1-409 | Me, CF3 | H, H | 5-Etynyl | H |
| 1-410 | Me, CF3 | H, H | 5-Ph | H |
| 1-411 | Me, CF3 | H, H | 5-FUR | H |
| 1-412 | Me, CF3 | H, H | 5-2THI | H |
| 1-413 | Me, CF3 | H, H | 5-3THI | H |
| 1-414 | Me, CF3 | H, H | 5-(2-Cl-2THI) | H |
| 1-415 | Me, CF3 | H, H | OXA | H |
| 1-416 | Me, CF3 | H, H | 5-MeMeIMD | H |
| 1-417 | Me, CF3 | H, H | 5-MeEtIMD | H |
| 1-418 | Me, CF3 | H, H | 5-EtEtIMD | H |
| 1-419 | Me, CF3 | H, H | 5-AllylEtIMD | H |
| 1-420 | Me, CF3 | H, H | 5-BnEtIMD | H |
| 1-421 | Me, CF3 | H, H | 5-PhEtIMD | H |
| 1-422 | Me, CF3 | H, H | 5-CN | H |

| | | | | |
|-------|--------------|------|---------------|-------|
| 1-423 | Me, CF3 | H, H | 5,6-F2 | H |
| 1-424 | Me, CF3CH2 | H, H | 5,6-Cl2 | H |
| 1-425 | Me, CF3CH2 | H, H | H | H |
| 1-426 | Me, CF3CH2 | H, H | H | 4-F |
| 1-427 | Me, CF3CH2 | H, H | H | 8-F |
| 1-428 | Me, CF3CH2 | H, H | H | 4-Cl |
| 1-429 | Me, CF3CH2 | H, H | H | 6-Cl |
| 1-430 | Me, CF3CH2 | H, H | H | 8-Cl |
| 1-431 | Me, CF3CH2 | H, H | H | 4-Me |
| 1-432 | Me, CF3CH2 | H, H | H | 8-Me |
| 1-433 | Me, CF3CH2 | H, H | H | 8-MeO |
| 1-434 | Me, CF3CH2 | H, H | H | 8-OH |
| 1-435 | Me, CF3CH2 | H, H | 5-F | H |
| 1-436 | Me, CF3CH2 | H, H | 6-F | H |
| 1-437 | Me, CF3CH2 | H, H | 7-F | H |
| 1-438 | Me, CF3CH2 | H, H | 5-Cl | H |
| 1-439 | Me, CF3CH2 | H, H | 6-Cl | H |
| 1-440 | Me, CF3CH2 | H, H | 7-Cl | H |
| 1-441 | Me, CF3CH2 | H, H | 5-Br | H |
| 1-442 | Me, CF3CH2 | H, H | 6-Br | H |
| 1-443 | Me, CF3CH2 | H, H | 7-Br | H |
| 1-444 | Me, CF3CH2 | H, H | 5-I | H |
| 1-445 | Me, CF3CH2 | H, H | 5-Me | H |
| 1-446 | Me, CF3CH2 | H, H | 5-Vinyl | H |
| 1-447 | Me, CF3CH2 | H, H | 5-Etynyl | H |
| 1-448 | Me, CF3CH2 | H, H | 5-Ph | H |
| 1-449 | Me, CF3CH2 | H, H | 5-FUR | H |
| 1-450 | Me, CF3CH2 | H, H | 5-2THI | H |
| 1-451 | Me, CF3CH2 | H, H | 5-3THI | H |
| 1-452 | Me, CF3CH2 | H, H | 5-(2-Cl-2THI) | H |
| 1-453 | Me, CF3CH2 | H, H | OXA | H |
| 1-454 | Me, CF3CH2 | H, H | 5-MeMeIMD | H |
| 1-455 | Me, CF3CH2 | H, H | 5-MeEtIMD | H |
| 1-456 | Me, CF3CH2 | H, H | 5-EtEtIMD | H |
| 1-457 | Me, CF3CH2 | H, H | 5-AllylEtIMD | H |
| 1-458 | Me, CF3CH2 | H, H | 5-BnEtIMD | H |
| 1-459 | Me, CF3CH2 | H, H | 5-PhEtIMD | H |
| 1-460 | Me, CF3CH2 | H, H | 5-CN | H |
| 1-461 | Me, CF3CH2 | H, H | 5,6-F2 | H |
| 1-462 | Me, CF3CH2 | H, H | 5,6-Cl2 | H |
| 1-463 | ClCH2, ClCH2 | H, H | H | H |
| 1-464 | Me, Ph | H, H | H | H |
| 1-465 | Me, Ph | H, H | H | 4-F |

| | | | | |
|-------|---------|------|---------------|-------|
| 1-466 | Me, Ph | H, H | H | 8-F |
| 1-467 | Me, Ph | H, H | H | 4-Cl |
| 1-468 | Me, Ph | H, H | H | 6-Cl |
| 1-469 | Me, Ph | H, H | H | 8-Cl |
| 1-470 | Me, Ph | H, H | H | 4-Me |
| 1-471 | Me, Ph | H, H | H | 8-Me |
| 1-472 | Me, Ph | H, H | H | 8-MeO |
| 1-473 | Me, Ph | H, H | H | 8-OH |
| 1-474 | Me, Ph | H, H | 5-F | H |
| 1-475 | Me, Ph | H, H | 6-F | H |
| 1-476 | Me, Ph | H, H | 7-F | H |
| 1-477 | Me, Ph | H, H | 5-Cl | H |
| 1-478 | Me, Ph | H, H | 6-Cl | H |
| 1-479 | Me, Ph | H, H | 7-Cl | H |
| 1-480 | Me, Ph | H, H | 5-Br | H |
| 1-481 | Me, Ph | H, H | 6-Br | H |
| 1-482 | Me, Ph | H, H | 7-Br | H |
| 1-483 | Me, Ph | H, H | 5-I | H |
| 1-484 | Me, Ph | H, H | 5-Me | H |
| 1-485 | Me, Ph | H, H | 5-Vinyl | H |
| 1-486 | Me, Ph | H, H | 5-Etynyl | H |
| 1-487 | Me, Ph | H, H | 5-Ph | H |
| 1-488 | Me, Ph | H, H | 5-FUR | H |
| 1-489 | Me, Ph | H, H | 5-2THI | H |
| 1-490 | Me, Ph | H, H | 5-3THI | H |
| 1-491 | Me, Ph | H, H | 5-(2-Cl-2THI) | H |
| 1-492 | Me, Ph | H, H | OXA | H |
| 1-493 | Me, Ph | H, H | 5-MeMeIMD | H |
| 1-494 | Me, Ph | H, H | 5-MeEtIMD | H |
| 1-495 | Me, Ph | H, H | 5-EtEtIMD | H |
| 1-496 | Me, Ph | H, H | 5-AllylEtIMD | H |
| 1-497 | Me, Ph | H, H | 5-BnEtIMD | H |
| 1-498 | Me, Ph | H, H | 5-PhEtIMD | H |
| 1-499 | Me, Ph | H, H | 5-CN | H |
| 1-500 | Me, Ph | H, H | 5,6-F2 | H |
| 1-501 | Me, Ph | H, H | 5,6-Cl2 | H |
| 1-502 | Me, FPh | H, H | H | H |
| 1-503 | Me, FPh | H, H | H | 4-F |
| 1-504 | Me, FPh | H, H | H | 8-F |
| 1-505 | Me, FPh | H, H | H | 4-Cl |
| 1-506 | Me, FPh | H, H | H | 6-Cl |
| 1-507 | Me, FPh | H, H | H | 8-Cl |
| 1-508 | Me, FPh | H, H | H | 4-Me |

| | | | | |
|-------|----------|------|---------------|-------|
| 1-509 | Me, FPh | H, H | H | 8-Me |
| 1-510 | Me, FPh | H, H | H | 8-MeO |
| 1-511 | Me, FPh | H, H | H | 8-OH |
| 1-512 | Me, FPh | H, H | 5-F | H |
| 1-513 | Me, FPh | H, H | 6-F | H |
| 1-514 | Me, FPh | H, H | 7-F | H |
| 1-515 | Me, FPh | H, H | 5-Cl | H |
| 1-516 | Me, FPh | H, H | 6-Cl | H |
| 1-517 | Me, FPh | H, H | 7-Cl | H |
| 1-518 | Me, FPh | H, H | 5-Br | H |
| 1-519 | Me, FPh | H, H | 6-Br | H |
| 1-520 | Me, FPh | H, H | 7-Br | H |
| 1-521 | Me, FPh | H, H | 5-I | H |
| 1-522 | Me, FPh | H, H | 5-Me | H |
| 1-523 | Me, FPh | H, H | 5-Vinyl | H |
| 1-524 | Me, FPh | H, H | 5-Etynyl | H |
| 1-525 | Me, FPh | H, H | 5-Ph | H |
| 1-526 | Me, FPh | H, H | 5-FUR | H |
| 1-527 | Me, FPh | H, H | 5-2THI | H |
| 1-528 | Me, FPh | H, H | 5-3THI | H |
| 1-529 | Me, FPh | H, H | 5-(2-Cl-2THI) | H |
| 1-530 | Me, FPh | H, H | OXA | H |
| 1-531 | Me, FPh | H, H | 5-MeMeIMD | H |
| 1-532 | Me, FPh | H, H | 5-MeEtIMD | H |
| 1-533 | Me, FPh | H, H | 5-EtEtIMD | H |
| 1-534 | Me, FPh | H, H | 5-AllylEtIMD | H |
| 1-535 | Me, FPh | H, H | 5-BnEtIMD | H |
| 1-536 | Me, FPh | H, H | 5-PhEtIMD | H |
| 1-537 | Me, FPh | H, H | 5-CN | H |
| 1-538 | Me, FPh | H, H | 5,6-F2 | H |
| 1-539 | Me, FPh | H, H | 5,6-Cl2 | H |
| 1-540 | Me, ClPh | H, H | H | H |
| 1-541 | Me, ClPh | H, H | H | 4-F |
| 1-542 | Me, ClPh | H, H | H | 8-F |
| 1-543 | Me, ClPh | H, H | H | 4-Cl |
| 1-544 | Me, ClPh | H, H | H | 6-Cl |
| 1-545 | Me, ClPh | H, H | H | 8-Cl |
| 1-546 | Me, ClPh | H, H | H | 4-Me |
| 1-547 | Me, ClPh | H, H | H | 8-Me |
| 1-548 | Me, ClPh | H, H | H | 8-MeO |
| 1-549 | Me, ClPh | H, H | H | 8-OH |
| 1-550 | Me, ClPh | H, H | 5-F | H |
| 1-551 | Me, ClPh | H, H | 6-F | H |

| | | | | |
|-------|------------|------|---------------|---|
| 1-552 | Me, ClPh | H, H | 7-F | H |
| 1-553 | Me, ClPh | H, H | 5-Cl | H |
| 1-554 | Me, ClPh | H, H | 6-Cl | H |
| 1-555 | Me, ClPh | H, H | 7-Cl | H |
| 1-556 | Me, ClPh | H, H | 5-Br | H |
| 1-557 | Me, ClPh | H, H | 6-Br | H |
| 1-558 | Me, ClPh | H, H | 7-Br | H |
| 1-559 | Me, ClPh | H, H | 5-I | H |
| 1-560 | Me, ClPh | H, H | 5-Me | H |
| 1-561 | Me, ClPh | H, H | 5-Vinyl | H |
| 1-562 | Me, ClPh | H, H | 5-Etynyl | H |
| 1-563 | Me, ClPh | H, H | 5-Ph | H |
| 1-564 | Me, ClPh | H, H | 5-FUR | H |
| 1-565 | Me, ClPh | H, H | 5-2THI | H |
| 1-566 | Me, ClPh | H, H | 5-3THI | H |
| 1-567 | Me, ClPh | H, H | 5-(2-Cl-2THI) | H |
| 1-568 | Me, ClPh | H, H | OXA | H |
| 1-569 | Me, ClPh | H, H | 5-MeEtIMD | H |
| 1-570 | Me, ClPh | H, H | 5-MeEtIMD | H |
| 1-571 | Me, ClPh | H, H | 5-EtEtIMD | H |
| 1-572 | Me, ClPh | H, H | 5-AllylEtIMD | H |
| 1-573 | Me, ClPh | H, H | 5-BnEtIMD | H |
| 1-574 | Me, ClPh | H, H | 5-PhEtIMD | H |
| 1-575 | Me, ClPh | H, H | 5-CN | H |
| 1-576 | Me, ClPh | H, H | 5,6-F2 | H |
| 1-577 | Me, ClPh | H, H | 5,6-Cl2 | H |
| 1-578 | Ph, CF3 | H, H | H | H |
| 1-579 | Ph, CF3 | H, H | 5-F | H |
| 1-580 | Ph, CF3 | H, H | 5-Cl | H |
| 1-581 | Ph, CF3 | H, H | 5-Br | H |
| 1-582 | Ph, CF3 | H, H | 5-I | H |
| 1-583 | Ph, CF3 | H, H | 5-Me | H |
| 1-584 | Ph, CF3 | H, H | 5-Vinyl | H |
| 1-585 | Ph, CF3 | H, H | 5-Etynyl | H |
| 1-586 | Ph, CF3 | H, H | 5-Ph | H |
| 1-587 | Ph, CF3 | H, H | 5-FUR | H |
| 1-588 | Ph, CF3 | H, H | 5-2THI | H |
| 1-589 | Ph, CF3 | H, H | 5-3THI | H |
| 1-590 | Ph, CF3 | H, H | 5-MeEtIMD | H |
| 1-591 | Ph, CF3 | H, H | 5-EtEtIMD | H |
| 1-592 | Ph, CF3 | H, H | 5-PhEtIMD | H |
| 1-593 | Ph, CF3 | H, H | 5-CN | H |
| 1-594 | ClCH2, FPh | H, H | H | H |

| | | | | |
|-------|--------------------------|------|---------------------|-------|
| 1-595 | ClCH ₂ , FPh | H, H | H | 4-F |
| 1-596 | ClCH ₂ , FPh | H, H | H | 8-F |
| 1-597 | ClCH ₂ , FPh | H, H | H | 4-Cl |
| 1-598 | ClCH ₂ , FPh | H, H | H | 6-Cl |
| 1-599 | ClCH ₂ , FPh | H, H | H | 8-Cl |
| 1-600 | ClCH ₂ , FPh | H, H | H | 4-Me |
| 1-601 | ClCH ₂ , FPh | H, H | H | 8-Me |
| 1-602 | ClCH ₂ , FPh | H, H | H | 8-MeO |
| 1-603 | ClCH ₂ , FPh | H, H | H | 8-OH |
| 1-604 | ClCH ₂ , FPh | H, H | 5-F | H |
| 1-605 | ClCH ₂ , FPh | H, H | 6-F | H |
| 1-606 | ClCH ₂ , FPh | H, H | 7-F | H |
| 1-607 | ClCH ₂ , FPh | H, H | 5-Cl | H |
| 1-608 | ClCH ₂ , FPh | H, H | 6-Cl | H |
| 1-609 | ClCH ₂ , FPh | H, H | 7-Cl | H |
| 1-610 | ClCH ₂ , FPh | H, H | 5-Br | H |
| 1-611 | ClCH ₂ , FPh | H, H | 6-Br | H |
| 1-612 | ClCH ₂ , FPh | H, H | 7-Br | H |
| 1-613 | ClCH ₂ , FPh | H, H | 5-I | H |
| 1-614 | ClCH ₂ , FPh | H, H | 5-Me | H |
| 1-615 | ClCH ₂ , FPh | H, H | 5-Vinyl | H |
| 1-616 | ClCH ₂ , FPh | H, H | 5-Etynyl | H |
| 1-617 | ClCH ₂ , FPh | H, H | 5-Ph | H |
| 1-618 | ClCH ₂ , FPh | H, H | 5-FUR | H |
| 1-619 | ClCH ₂ , FPh | H, H | 5-2THI | H |
| 1-620 | ClCH ₂ , FPh | H, H | 5-3THI | H |
| 1-621 | ClCH ₂ , FPh | H, H | 5-(2-Cl-2THI) | H |
| 1-622 | ClCH ₂ , FPh | H, H | OXA | H |
| 1-623 | ClCH ₂ , FPh | H, H | 5-MeMeIMD | H |
| 1-624 | ClCH ₂ , FPh | H, H | 5-MeEtIMD | H |
| 1-625 | ClCH ₂ , FPh | H, H | 5-EtEtIMD | H |
| 1-626 | ClCH ₂ , FPh | H, H | 5-AllylEtIMD | H |
| 1-627 | ClCH ₂ , FPh | H, H | 5-BnEtIMD | H |
| 1-628 | ClCH ₂ , FPh | H, H | 5-PhEtIMD | H |
| 1-629 | ClCH ₂ , FPh | H, H | 5-CN | H |
| 1-630 | ClCH ₂ , FPh | H, H | 5,6-F ₂ | H |
| 1-631 | ClCH ₂ , FPh | H, H | 5,6-Cl ₂ | H |
| 1-632 | ClCH ₂ , ClPh | H, H | H | H |
| 1-633 | ClCH ₂ , ClPh | H, H | H | 4-F |
| 1-634 | ClCH ₂ , ClPh | H, H | H | 8-F |
| 1-635 | ClCH ₂ , ClPh | H, H | H | 4-Cl |
| 1-636 | ClCH ₂ , ClPh | H, H | H | 6-Cl |
| 1-637 | ClCH ₂ , ClPh | H, H | H | 8-Cl |

| | | | | |
|-------|--------------------------|------|---------------------|-------|
| 1-638 | ClCH ₂ , ClPh | H, H | H | 4-Me |
| 1-639 | ClCH ₂ , ClPh | H, H | H | 8-Me |
| 1-640 | ClCH ₂ , ClPh | H, H | H | 8-MeO |
| 1-641 | ClCH ₂ , ClPh | H, H | H | 8-OH |
| 1-642 | ClCH ₂ , ClPh | H, H | 5-F | H |
| 1-643 | ClCH ₂ , ClPh | H, H | 6-F | H |
| 1-644 | ClCH ₂ , ClPh | H, H | 7-F | H |
| 1-645 | ClCH ₂ , ClPh | H, H | 5-Cl | H |
| 1-646 | ClCH ₂ , ClPh | H, H | 6-Cl | H |
| 1-647 | ClCH ₂ , ClPh | H, H | 7-Cl | H |
| 1-648 | ClCH ₂ , ClPh | H, H | 5-Br | H |
| 1-649 | ClCH ₂ , ClPh | H, H | 6-Br | H |
| 1-650 | ClCH ₂ , ClPh | H, H | 7-Br | H |
| 1-651 | ClCH ₂ , ClPh | H, H | 5-I | H |
| 1-652 | ClCH ₂ , ClPh | H, H | 5-Me | H |
| 1-653 | ClCH ₂ , ClPh | H, H | 5-Vinyl | H |
| 1-654 | ClCH ₂ , ClPh | H, H | 5-Etynyl | H |
| 1-655 | ClCH ₂ , ClPh | H, H | 5-Ph | H |
| 1-656 | ClCH ₂ , ClPh | H, H | 5-FUR | H |
| 1-657 | ClCH ₂ , ClPh | H, H | 5-2THI | H |
| 1-658 | ClCH ₂ , ClPh | H, H | 5-3THI | H |
| 1-659 | ClCH ₂ , ClPh | H, H | 5-(2-Cl-2THI) | H |
| 1-660 | ClCH ₂ , ClPh | H, H | OXA | H |
| 1-661 | ClCH ₂ , ClPh | H, H | 5-MeMeIMD | H |
| 1-662 | ClCH ₂ , ClPh | H, H | 5-MeEtIMD | H |
| 1-663 | ClCH ₂ , ClPh | H, H | 5-EtEtIMD | H |
| 1-664 | ClCH ₂ , ClPh | H, H | 5-AllylEtIMD | H |
| 1-665 | ClCH ₂ , ClPh | H, H | 5-BnEtIMD | H |
| 1-666 | ClCH ₂ , ClPh | H, H | 5-PhEtIMD | H |
| 1-667 | ClCH ₂ , ClPh | H, H | 5-CN | H |
| 1-668 | ClCH ₂ , ClPh | H, H | 5,6-F ₂ | H |
| 1-669 | ClCH ₂ , ClPh | H, H | 5,6-Cl ₂ | H |
| 1-670 | Me, 3PYD | H, H | H | H |
| 1-671 | Me, 4PYD | H, H | H | H |
| 1-672 | Me, Bn | H, H | H | H |
| 1-673 | Me, Bn | H, H | H | 4-F |
| 1-674 | Me, Bn | H, H | H | 8-F |
| 1-675 | Me, Bn | H, H | H | 4-Cl |
| 1-676 | Me, Bn | H, H | H | 6-Cl |
| 1-677 | Me, Bn | H, H | H | 8-Cl |
| 1-678 | Me, Bn | H, H | H | 4-Me |
| 1-679 | Me, Bn | H, H | H | 8-Me |
| 1-680 | Me, Bn | H, H | H | 8-MeO |

| | | | | |
|-------|--------|------|---------------|-------|
| 1-681 | Me, Bn | H, H | H | 8-OH |
| 1-682 | Me, Bn | H, H | 5-F | H |
| 1-683 | Me, Bn | H, H | 6-F | H |
| 1-684 | Me, Bn | H, H | 7-F | H |
| 1-685 | Me, Bn | H, H | 5-Cl | H |
| 1-686 | Me, Bn | H, H | 6-Cl | H |
| 1-687 | Me, Bn | H, H | 7-Cl | H |
| 1-688 | Me, Bn | H, H | 5-Br | H |
| 1-689 | Me, Bn | H, H | 6-Br | H |
| 1-690 | Me, Bn | H, H | 7-Br | H |
| 1-691 | Me, Bn | H, H | 5-I | H |
| 1-692 | Me, Bn | H, H | 5-Me | H |
| 1-693 | Me, Bn | H, H | 5-Vinyl | H |
| 1-694 | Me, Bn | H, H | 5-Etynyl | H |
| 1-695 | Me, Bn | H, H | 5-Ph | H |
| 1-696 | Me, Bn | H, H | 5-FUR | H |
| 1-697 | Me, Bn | H, H | 5-2THI | H |
| 1-698 | Me, Bn | H, H | 5-3THI | H |
| 1-699 | Me, Bn | H, H | 5-(2-Cl-2THI) | H |
| 1-700 | Me, Bn | H, H | OXA | H |
| 1-701 | Me, Bn | H, H | 5-MeMeIMD | H |
| 1-702 | Me, Bn | H, H | 5-MeEtIMD | H |
| 1-703 | Me, Bn | H, H | 5-EtEtIMD | H |
| 1-704 | Me, Bn | H, H | 5-AllylEtIMD | H |
| 1-705 | Me, Bn | H, H | 5-BnEtIMD | H |
| 1-706 | Me, Bn | H, H | 5-PhEtIMD | H |
| 1-707 | Me, Bn | H, H | 5-CN | H |
| 1-708 | Me, Bn | H, H | 5,6-F2 | H |
| 1-709 | Me, Bn | H, H | 5,6-Cl2 | H |
| 1-710 | cPen | H, H | H | H |
| 1-711 | cPen | H, H | H | 4-F |
| 1-712 | cPen | H, H | H | 8-F |
| 1-713 | cPen | H, H | H | 4-Cl |
| 1-714 | cPen | H, H | H | 6-Cl |
| 1-715 | cPen | H, H | H | 8-Cl |
| 1-716 | cPen | H, H | H | 4-Me |
| 1-717 | cPen | H, H | H | 8-Me |
| 1-718 | cPen | H, H | H | 8-MeO |
| 1-719 | cPen | H, H | H | 8-OH |
| 1-720 | cPen | H, H | 5-F | H |
| 1-721 | cPen | H, H | 6-F | H |
| 1-722 | cPen | H, H | 7-F | H |
| 1-723 | cPen | H, H | 6-F | 4-Me |

| | | | | |
|-------|------|------|---------------|-------|
| 1-724 | cPen | H, H | 5-Cl | H |
| 1-725 | cPen | H, H | 6-Cl | H |
| 1-726 | cPen | H, H | 7-Cl | H |
| 1-727 | cPen | H, H | 5-Br | H |
| 1-728 | cPen | H, H | 6-Br | H |
| 1-729 | cPen | H, H | 7-Br | H |
| 1-730 | cPen | H, H | 5-I | H |
| 1-731 | cPen | H, H | 5-Me | H |
| 1-732 | cPen | H, H | 5-Vinyl | H |
| 1-733 | cPen | H, H | 5-Etynyl | H |
| 1-734 | cPen | H, H | 5-Ph | H |
| 1-735 | cPen | H, H | 5-FUR | H |
| 1-736 | cPen | H, H | 5-2THI | H |
| 1-737 | cPen | H, H | 5-3THI | H |
| 1-738 | cPen | H, H | 5-(2-Cl-2THI) | H |
| 1-739 | cPen | H, H | OXA | H |
| 1-740 | cPen | H, H | 5-MeMeIMD | H |
| 1-741 | cPen | H, H | 5-MeEtIMD | H |
| 1-742 | cPen | H, H | 5-EtEtIMD | H |
| 1-743 | cPen | H, H | 5-AllylEtIMD | H |
| 1-744 | cPen | H, H | 5-BnEtIMD | H |
| 1-745 | cPen | H, H | 5-PhEtIMD | H |
| 1-746 | cPen | H, H | 5-CN | H |
| 1-747 | cPen | H, H | 5,6-F2 | H |
| 1-748 | cPen | H, H | 5,6-Cl2 | H |
| 1-749 | cHex | H, H | H | H |
| 1-750 | cHex | H, H | H | 4-F |
| 1-751 | cHex | H, H | H | 8-F |
| 1-752 | cHex | H, H | H | 4-Cl |
| 1-753 | cHex | H, H | H | 6-Cl |
| 1-754 | cHex | H, H | H | 8-Cl |
| 1-755 | cHex | H, H | H | 4-Me |
| 1-756 | cHex | H, H | H | 8-Me |
| 1-757 | cHex | H, H | H | 8-MeO |
| 1-758 | cHex | H, H | H | 8-OH |
| 1-759 | cHex | H, H | 5-F | H |
| 1-760 | cHex | H, H | 6-F | H |
| 1-761 | cHex | H, H | 7-F | H |
| 1-762 | cHex | H, H | 5-F | 4-Me |
| 1-763 | cHex | H, H | 5-Cl | H |
| 1-764 | cHex | H, H | 6-Cl | H |
| 1-765 | cHex | H, H | 7-Cl | H |
| 1-766 | cHex | H, H | 5-Cl | 4-Me |

| | | | | | |
|-------|--------|------|---------------|------|----------------------------------|
| 1-767 | cHex | H, H | 5-Br | H | |
| 1-768 | cHex | H, H | 6-Br | H | |
| 1-769 | cHex | H, H | 7-Br | H | |
| 1-770 | cHex | H, H | 5-I | H | |
| 1-771 | cHex | H, H | 5-Me | H | |
| 1-772 | cHex | H, H | 6-Me | H | |
| 1-773 | cHex | H, H | 7-Me | H | |
| 1-774 | cHex | H, H | 6-Me | 4-Me | |
| 1-775 | cHex | H, H | 5-FUR | H | |
| 1-776 | cHex | H, H | 5-2THI | H | |
| 1-777 | cHex | H, H | 5-3THI | H | |
| 1-778 | cHex | H, H | 5-(2-Cl-2THI) | H | |
| 1-779 | cHex | H, H | OXA | H | |
| 1-780 | cHex | H, H | 5-MeMeIMD | H | |
| 1-781 | cHex | H, H | 5-MeEtIMD | H | |
| 1-782 | cHex | H, H | 5-EtEtIMD | H | |
| 1-783 | cHex | H, H | 5-AllylEtIMD | H | |
| 1-784 | cHex | H, H | 5-BnEtIMD | H | |
| 1-785 | cHex | H, H | 5-PhEtIMD | H | |
| 1-786 | cHex | H, H | 6-CN | H | |
| 1-787 | cHex | H, H | 5,6-F2 | H | |
| 1-788 | cHex | H, H | 5,6-Cl2 | H | |
| 1-789 | cHep | H, H | H | H | |
| 1-790 | MecPen | H, H | H | H | |
| 1-791 | Pyran | H, H | H | H | |
| 1-792 | Me, Me | H, H | H | H | HCl塩 |
| 1-793 | Me, Me | H, H | 5-F | H | HCl塩 |
| 1-794 | Me, Me | H, H | 5-Cl | H | HCl塩 |
| 1-795 | Me, Me | H, H | H | H | H ₂ SO ₄ 塩 |
| 1-796 | Me, Me | H, H | 5-F | H | H ₂ SO ₄ 塩 |
| 1-797 | Me, Me | H, H | 5-Cl | H | H ₂ SO ₄ 塩 |
| 1-798 | Me, Me | H, H | H | H | HNO ₃ 塩 |
| 1-799 | Me, Me | H, H | 5-F | H | HNO ₃ 塩 |
| 1-800 | Me, Me | H, H | 5-Cl | H | HNO ₃ 塩 |
| 1-801 | Me, Me | H, H | H | H | (COOH) ₂ 塩 |
| 1-802 | Me, Me | H, H | 5-F | H | (COOH) ₂ 塩 |
| 1-803 | Me, Me | H, H | H | H | MsOH塩 |
| 1-804 | Me, Me | H, H | 5-F | H | MsOH塩 |
| 1-805 | Me, Me | H, H | H | H | Salicylate |
| 1-806 | Me, Me | H, H | 5-F | H | Salicylate |
| 1-807 | Me, Me | H, H | 5-F | H | fumarate |
| 1-808 | Me, Et | H, H | H | H | HCl塩 |

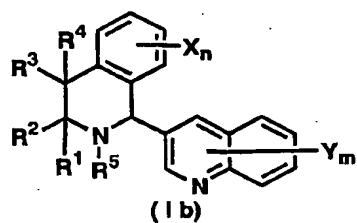
| | | | | | |
|-------|--------|------|------|---|----------------------------------|
| 1-809 | Me, Et | H, H | 5-F | H | HCl塩 |
| 1-810 | Me, Et | H, H | 5-Cl | H | HCl塩 |
| 1-811 | Me, Et | H, H | H | H | H ₂ SO ₄ 塩 |
| 1-812 | Me, Et | H, H | 5-F | H | H ₂ SO ₄ 塩 |
| 1-813 | Me, Et | H, H | 5-Cl | H | H ₂ SO ₄ 塩 |
| 1-814 | Me, Et | H, H | H | H | HNO ₃ 塩 |
| 1-815 | Me, Et | H, H | 5-F | H | HNO ₃ 塩 |
| 1-816 | Me, Et | H, H | 5-Cl | H | HNO ₃ 塩 |
| 1-817 | Me, Et | H, H | H | H | (COOH) ₂ 塩 |
| 1-818 | Me, Et | H, H | 5-F | H | (COOH) ₂ 塩 |
| 1-819 | Me, Et | H, H | H | H | MsOH塩 |
| 1-820 | Me, Et | H, H | 5-F | H | MsOH塩 |
| 1-821 | Me, Et | H, H | H | H | Salicylate |
| 1-822 | Me, Et | H, H | 5-F | H | Salicylate |
| 1-823 | Me, Et | H, H | 5-F | H | fumarate |
| 1-824 | Me, Pr | H, H | H | H | HCl塩 |
| 1-825 | Me, Pr | H, H | 5-F | H | HCl塩 |
| 1-826 | Me, Pr | H, H | 5-Cl | H | HCl塩 |
| 1-827 | Me, Pr | H, H | H | H | H ₂ SO ₄ 塩 |
| 1-828 | Me, Pr | H, H | 5-F | H | H ₂ SO ₄ 塩 |
| 1-829 | Me, Pr | H, H | 5-Cl | H | H ₂ SO ₄ 塩 |
| 1-830 | Me, Pr | H, H | H | H | HNO ₃ 塩 |
| 1-831 | Me, Pr | H, H | 5-F | H | HNO ₃ 塩 |
| 1-832 | Me, Pr | H, H | 5-Cl | H | HNO ₃ 塩 |
| 1-833 | Me, Pr | H, H | H | H | (COOH) ₂ 塩 |
| 1-834 | Me, Pr | H, H | 5-F | H | (COOH) ₂ 塩 |
| 1-835 | Me, Pr | H, H | H | H | MsOH塩 |
| 1-836 | Me, Pr | H, H | 5-F | H | MsOH塩 |
| 1-837 | Me, Pr | H, H | H | H | Salicylate |
| 1-838 | Me, Pr | H, H | 5-F | H | Salicylate |
| 1-839 | Me, Pr | H, H | 5-F | H | fumarate |
| 1-840 | Me, Ph | H, H | H | H | HCl塩 |
| 1-841 | Me, Ph | H, H | 5-F | H | HCl塩 |
| 1-842 | Me, Ph | H, H | 5-Cl | H | HCl塩 |
| 1-843 | Me, Ph | H, H | H | H | H ₂ SO ₄ 塩 |
| 1-844 | Me, Ph | H, H | 5-F | H | H ₂ SO ₄ 塩 |
| 1-845 | Me, Ph | H, H | 5-Cl | H | H ₂ SO ₄ 塩 |
| 1-846 | Me, Ph | H, H | H | H | HNO ₃ 塩 |
| 1-847 | Me, Ph | H, H | 5-F | H | HNO ₃ 塩 |

| | | | | | |
|-------|--------|--------|------|---|-----------------------|
| 1-848 | Me, Ph | H, H | 5-Cl | H | HNO ₃ 塩 |
| 1-849 | Me, Ph | H, H | H | H | (COOH) ₂ 塩 |
| 1-850 | Me, Ph | H, H | 5-F | H | (COOH) ₂ 塩 |
| 1-851 | Me, Ph | H, H | H | H | MsOH塩 |
| 1-852 | Me, Ph | H, H | 5-F | H | MsOH塩 |
| 1-853 | Me, Ph | H, H | H | H | Salicylate |
| 1-854 | Me, Ph | H, H | 5-F | H | Salicylate |
| 1-855 | Me, Ph | H, H | 5-F | H | fumarate |
| 1-856 | Me, Me | H, Me | H | H | |
| 1-857 | Me, Me | H, Me | 5-F | H | |
| 1-858 | Me, Me | H, Me | 5-Cl | H | |
| 1-859 | Me, Me | H, Et | H | H | |
| 1-860 | Me, Me | H, Et | 5-F | H | |
| 1-861 | Me, Me | H, Et | 5-Cl | H | |
| 1-862 | Me, Me | H, Pr | H | H | |
| 1-863 | Me, Me | H, Pr | 5-F | H | |
| 1-864 | Me, Me | H, Pr | 5-Cl | H | |
| 1-865 | Me, Me | Me, Me | H | H | |
| 1-866 | Me, Me | Me, Me | 5-F | H | |
| 1-867 | Me, Me | Me, Me | 5-Cl | H | |
| 1-868 | Me, Et | H, Me | H | H | |
| 1-869 | Me, Et | H, Me | 5-F | H | |
| 1-870 | Me, Et | H, Me | 5-Cl | H | |
| 1-871 | Me, Pr | H, Me | H | H | |
| 1-872 | Me, Pr | H, Me | 5-F | H | |
| 1-873 | Me, Pr | H, Me | 5-Cl | H | |
| 1-874 | Me, Ph | H, Me | H | H | |
| 1-875 | Me, Ph | H, Me | 5-F | H | |
| 1-876 | Me, Ph | H, Me | 5-Cl | H | |
| 1-877 | Me, Ph | Me, Me | H | H | |
| 1-878 | Me, Ph | Me, Me | 5-F | H | |
| 1-879 | Me, Ph | Me, Me | 5-Cl | H | |

| | | | | | |
|-------|--------|--------|-----------------------------------------|-------|----------------------------------|
| 1-880 | Me, Me | H, H | 5-iPr | H | |
| 1-881 | Me, Me | H, H | 5-CH(Me)CH ₂ CH ₃ | H | |
| 1-882 | Me, Me | H, H | 5-C(Me)=CH ₂ | H | |
| 1-883 | Me, Me | H, H | 5-CH=CHCO ₂ Me | H | |
| 1-884 | Me, Me | H, H | 5-CH ₂ F | H | |
| 1-885 | Me, Me | H, H | 5-CH ₂ Cl | H | |
| 1-886 | Me, Me | H, H | 5-CHF ₂ | H | |
| 1-887 | Me, Me | H, H | 5-CH ₂ OH | H | |
| 1-888 | Me, Me | H, H | 5-C(Me) ₂ OH | H | |
| 1-889 | Me, Me | H, H | 5-CH ₂ OMe | H | |
| 1-890 | Me, Me | H, H | 5-CH ₂ CO ₂ Me | H | |
| 1-891 | Me, Me | H, H | 5-NHCOPh | H | |
| 1-892 | Me, Me | H, H | 5-NHCO(2-FPh) | H | |
| 1-893 | Me, Me | H, H | 5-NHCO(3-FPh) | H | |
| 1-894 | Me, Me | H, H | 5-NHCO(4-FPh) | H | |
| 1-895 | Me, Me | H, H | 5-CO ₂ H | H | |
| 1-896 | Me, Me | H, H | 5-CO ₂ Me | H | |
| 1-897 | Me, Me | H, H | 5-CO ₂ Et | H | |
| 1-898 | Me, Me | H, H | 5-CONH ₂ | H | |
| 1-899 | Me, Me | H, H | 5-F | 2-Me | |
| 1-900 | Me, Me | H, H | 5-F | 4-Me | |
| 1-901 | Me, Me | H, Me | 5-F | 2-Me | |
| 1-902 | Me, Me | H, Me | 5-F | 8-Me | |
| 1-903 | Me, Me | H, Me | 5-F | 8-MeO | |
| 1-904 | Me, Me | Me, Me | 6-F | H | |
| 1-905 | Me, Me | Me, Me | 7-F | H | |
| 1-906 | Me, Me | Me, Me | 5-F | 2-Me | |
| 1-907 | Me, Me | Me, Me | 5-F | 4-Me | |
| 1-908 | Me, Me | Me, Me | 6-Cl | H | |
| 1-909 | Me, Me | Me, Me | 7-Cl | H | |
| 1-910 | Me, Me | Me, Me | 5-F | H | HCl 塩 |
| 1-911 | Me, Me | Me, Me | 5-F | H | H ₂ SO ₄ 塩 |
| 1-912 | Me, Me | Me, Me | 5-F | H | HNO ₃ 塩 |
| 1-913 | Me, Me | Me, Me | 5-F | H | MsOH 塩 |
| 1-914 | Me, Me | Me, Me | 5-Me | H | |
| 1-915 | Me, Me | Me, Me | 6-Me | H | |
| 1-916 | Me, Me | Me, Me | 7-Me | H | |
| 1-917 | Me, Me | Me, Me | 5-F | 6-F | |
| 1-918 | Me, Me | Me, Me | 5-F | 8-F | |
| 1-919 | Me, Me | Me, Me | 5-F | 8-Me | |
| 1-920 | Me, Me | Me, Me | 5-F | 8-MeO | |
| 1-921 | Me, Me | cPen | H | H | |
| 1-922 | cPen | Me, Me | H | H | |
| 1-923 | Me, Me | cHex | H | H | |

| | | | | |
|-------|--------|-------------------|---------------------|---|
| 1-924 | cHex | Me, Me | H | H |
| 1-925 | cBu | H, H | 5-F | H |
| 1-926 | Me, Me | CH ₂ = | 5-F | H |
| 1-927 | Me, Me | H, F | 5-F | H |
| 1-928 | Me, Me | H, Cl | 5-F | H |
| 1-929 | Me, Me | F, F | H | H |
| 1-930 | Me, Me | F, F | 5-F | H |
| 1-931 | Me, Me | H, OH | 5-F | H |
| 1-932 | Me, Me | H, OMe | 5-F | H |
| 1-933 | Me, Me | O= | H | H |
| 1-934 | Me, Me | O= | 5-F | H |
| 1-935 | Me, Me | Me, OH | 5-F | H |
| 1-936 | Me, Me | Et, OH | 5-F | H |
| 1-937 | Me, Me | Me, OMe | 5-F | H |
| 1-938 | Me, Me | Me, OEt | 5-F | H |
| 1-939 | Me, Me | Et, OMe | 5-F | H |
| 1-940 | Me, Me | F, F | 6-F | H |
| 1-941 | Me, Me | F, F | 7-F | H |
| 1-942 | Me, Me | F, F | 5-Cl | H |
| 1-943 | Me, Me | F, F | 6-Cl | H |
| 1-944 | Me, Me | F, F | 7-Cl | H |
| 1-945 | Me, Me | F, F | 5-Br | H |
| 1-946 | Me, Me | F, F | 6-Br | H |
| 1-947 | Me, Me | F, F | 7-Br | H |
| 1-948 | Me, Me | F, F | 5-Me | H |
| 1-949 | Me, Me | F, F | 6-Me | H |
| 1-950 | Me, Me | F, F | 6-MeO | H |
| 1-951 | Me, Me | F, F | 5,7-Cl ₂ | H |
| 1-952 | Me, Me | F, F | 6-F,7-Me | H |
| 1-953 | Me, Me | O= | 6-F | H |
| 1-954 | Me, Me | O= | 7-F | H |
| 1-955 | Me, Me | O= | 5-Cl | H |
| 1-956 | Me, Me | O= | 6-Cl | H |
| 1-957 | Me, Me | O= | 7-Cl | H |
| 1-958 | Me, Me | O= | 5-Br | H |
| 1-959 | Me, Me | O= | 6-Br | H |
| 1-960 | Me, Me | O= | 7-Br | H |

表 2



| 化合物番号 | R1, R2 | R3, R4 | R5 | Xn | Ym |
|-------|--------|--------|----|----|-------|
| 2-1 | Me, Me | H, H | H | H | H |
| 2-2 | Me, Me | H, H | H | H | 2-F |
| 2-3 | Me, Me | H, H | H | H | 4-F |
| 2-4 | Me, Me | H, H | H | H | 5-F |
| 2-5 | Me, Me | H, H | H | H | 6-F |
| 2-6 | Me, Me | H, H | H | H | 7-F |
| 2-7 | Me, Me | H, H | H | H | 8-F |
| 2-8 | Me, Me | H, H | H | H | 2-Cl |
| 2-9 | Me, Me | H, H | H | H | 4-Cl |
| 2-10 | Me, Me | H, H | H | H | 5-Cl |
| 2-11 | Me, Me | H, H | H | H | 6-Cl |
| 2-12 | Me, Me | H, H | H | H | 7-Cl |
| 2-13 | Me, Me | H, H | H | H | 8-Cl |
| 2-14 | Me, Me | H, H | H | H | 2-Me |
| 2-15 | Me, Me | H, H | H | H | 4-Me |
| 2-16 | Me, Me | H, H | H | H | 5-Me |
| 2-17 | Me, Me | H, H | H | H | 6-Me |
| 2-18 | Me, Me | H, H | H | H | 7-Me |
| 2-19 | Me, Me | H, H | H | H | 8-Me |
| 2-20 | Me, Me | H, H | H | H | 2-MeO |
| 2-21 | Me, Me | H, H | H | H | 4-MeO |
| 2-22 | Me, Me | H, H | H | H | 5-MeO |
| 2-23 | Me, Me | H, H | H | H | 6-MeO |
| 2-24 | Me, Me | H, H | H | H | 7-MeO |
| 2-25 | Me, Me | H, H | H | H | 8-MeO |
| 2-26 | Me, Me | H, H | H | H | 2-OH |
| 2-27 | Me, Me | H, H | H | H | 4-OH |
| 2-28 | Me, Me | H, H | H | H | 5-OH |
| 2-29 | Me, Me | H, H | H | H | 6-OH |
| 2-30 | Me, Me | H, H | H | H | 7-OH |
| 2-31 | Me, Me | H, H | H | H | 8-OH |

| | | | | | |
|------|--------|------|----|-----------|---|
| 2-32 | Me, Me | H, H | H | H | H |
| 2-33 | Me, Me | H, H | Me | H | H |
| 2-34 | Me, Me | H, H | Et | H | H |
| 2-35 | Me, Me | H, H | Pr | H | H |
| 2-36 | Me, Me | H, H | H | 5-F | H |
| 2-37 | Me, Me | H, H | Me | 5-F | H |
| 2-38 | Me, Me | H, H | Et | 5-F | H |
| 2-39 | Me, Me | H, H | Pr | 5-F | H |
| 2-40 | Me, Me | H, H | H | 5-Cl | H |
| 2-41 | Me, Me | H, H | Me | 5-Cl | H |
| 2-42 | Me, Me | H, H | Et | 5-Cl | H |
| 2-43 | Me, Me | H, H | Pr | 5-Cl | H |
| 2-44 | Me, Me | H, H | H | 5-Br | H |
| 2-45 | Me, Me | H, H | Me | 5-Br | H |
| 2-46 | Me, Me | H, H | Et | 5-Br | H |
| 2-47 | Me, Me | H, H | Pr | 5-Br | H |
| 2-48 | Me, Me | H, H | H | 5-I | H |
| 2-49 | Me, Me | H, H | Me | 5-I | H |
| 2-50 | Me, Me | H, H | Et | 5-I | H |
| 2-51 | Me, Me | H, H | Pr | 5-I | H |
| 2-52 | Me, Me | H, H | H | 5-MeEtIMD | H |
| 2-53 | Me, Me | H, H | Me | 5-MeEtIMD | H |
| 2-54 | Me, Me | H, H | Et | 5-MeEtIMD | H |
| 2-55 | Me, Me | H, H | Pr | 5-MeEtIMD | H |
| 2-56 | Me, Me | H, H | H | 5-EtEtIMD | H |
| 2-57 | Me, Me | H, H | Me | 5-EtEtIMD | H |
| 2-58 | Me, Me | H, H | Et | 5-EtEtIMD | H |
| 2-59 | Me, Me | H, H | Pr | 5-EtEtIMD | H |
| 2-60 | Me, Me | H, H | H | 5-PrEtIMD | H |
| 2-61 | Me, Me | H, H | Me | 5-PrEtIMD | H |
| 2-62 | Me, Me | H, H | Et | 5-PrEtIMD | H |
| 2-63 | Me, Me | H, H | Pr | 5-PrEtIMD | H |
| 2-64 | Me, Me | H, H | H | 5,6-F2 | H |
| 2-65 | Me, Me | H, H | Me | 5,6-F2 | H |
| 2-66 | Me, Me | H, H | Et | 5,6-F2 | H |
| 2-67 | Me, Me | H, H | Pr | 5,6-F2 | H |
| 2-68 | Me, Me | H, H | H | 5,6-Cl2 | H |
| 2-69 | Me, Me | H, H | Me | 5,6-Cl2 | H |
| 2-70 | Me, Me | H, H | Et | 5,6-Cl2 | H |

| | | | | | |
|-------|---------|------|----|---------------------|---|
| 2-71 | Me, Me | H, H | Pr | 5,6-Cl ₂ | H |
| 2-72 | Me, Et | H, H | H | H | H |
| 2-73 | Me, Et | H, H | H | 5-F | H |
| 2-74 | Me, Et | H, H | H | 5-Cl | H |
| 2-75 | Me, Et | H, H | H | 5-Br | H |
| 2-76 | Me, Et | H, H | H | 5-I | H |
| 2-77 | Me, Et | H, H | H | 5-MeMeIMD | H |
| 2-78 | Me, Et | H, H | H | 5-MeEtIMD | H |
| 2-79 | Me, Et | H, H | H | 5-EtEtIMD | H |
| 2-80 | Me, Et | H, H | H | 5,6-F ₂ | H |
| 2-81 | Me, Et | H, H | H | 5,6-Cl ₂ | H |
| 2-82 | Me, Pr | H, H | H | H | H |
| 2-83 | Me, Pr | H, H | H | 5-F | H |
| 2-84 | Me, Pr | H, H | H | 5-Cl | H |
| 2-85 | Me, Pr | H, H | H | 5-Br | H |
| 2-86 | Me, Pr | H, H | H | 5-I | H |
| 2-87 | Me, Pr | H, H | H | 5-MeMeIMD | H |
| 2-88 | Me, Pr | H, H | H | 5-MeEtIMD | H |
| 2-89 | Me, Pr | H, H | H | 5-EtEtIMD | H |
| 2-90 | Me, Pr | H, H | H | 5,6-F ₂ | H |
| 2-91 | Me, Pr | H, H | H | 5,6-Cl ₂ | H |
| 2-92 | Me, iPr | H, H | H | H | H |
| 2-93 | Me, iPr | H, H | H | 5-F | H |
| 2-94 | Me, iPr | H, H | H | 5-Cl | H |
| 2-95 | Me, iPr | H, H | H | 5-Br | H |
| 2-96 | Me, iPr | H, H | H | 5-I | H |
| 2-97 | Me, iPr | H, H | H | 5-MeMeIMD | H |
| 2-98 | Me, iPr | H, H | H | 5-MeEtIMD | H |
| 2-99 | Me, iPr | H, H | H | 5-EtEtIMD | H |
| 2-100 | Me, iPr | H, H | H | 5,6-F ₂ | H |
| 2-101 | Me, iPr | H, H | H | 5,6-Cl ₂ | H |
| 2-102 | Me, iBu | H, H | H | H | H |
| 2-103 | Me, iBu | H, H | H | 5-F | H |
| 2-104 | Me, iBu | H, H | H | 5-Cl | H |
| 2-105 | Me, iBu | H, H | H | 5-Br | H |
| 2-106 | Me, iBu | H, H | H | 5-I | H |
| 2-107 | Me, iBu | H, H | H | 5-MeMeIMD | H |
| 2-108 | Me, iBu | H, H | H | 5-MeEtIMD | H |
| 2-109 | Me, iBu | H, H | H | 5-EtEtIMD | H |
| 2-110 | Me, iBu | H, H | H | 5,6-F ₂ | H |
| 2-111 | Me, iBu | H, H | H | 5,6-Cl ₂ | H |
| 2-112 | Me, tBu | H, H | H | H | H |
| 2-113 | Me, tBu | H, H | H | 5-F | H |
| 2-114 | Me, tBu | H, H | H | 5-Cl | H |
| 2-115 | Me, tBu | H, H | H | 5-Br | H |

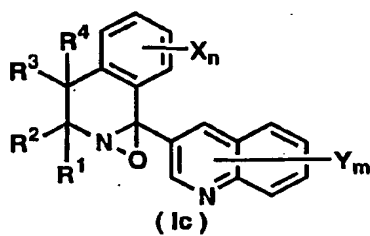
| | | | | | |
|-------|------------|------|---|-----------|---|
| 2-116 | Me, tBu | H, H | H | 5-MeEtIMD | H |
| 2-117 | Me, tBu | H, H | H | 5-EtEtIMD | H |
| 2-118 | Me, iPen | H, H | H | H | H |
| 2-119 | Me, iPen | H, H | H | 5-F | H |
| 2-120 | Me, iPen | H, H | H | 5-Cl | H |
| 2-121 | Me, iPen | H, H | H | 5-Br | H |
| 2-122 | Me, iPen | H, H | H | 5-I | H |
| 2-123 | Me, iPen | H, H | H | 5-MeMeIMD | H |
| 2-124 | Me, iPen | H, H | H | 5-MeEtIMD | H |
| 2-125 | Me, iPen | H, H | H | 5-EtEtIMD | H |
| 2-126 | Me, iPen | H, H | H | 5,6-F2 | H |
| 2-127 | Me, iPen | H, H | H | 5,6-Cl2 | H |
| 2-128 | Et, Et | H, H | H | H | H |
| 2-129 | Et, Et | H, H | H | 5-F | H |
| 2-130 | Et, Et | H, H | H | 5-Cl | H |
| 2-131 | Et, Et | H, H | H | 5-Br | H |
| 2-132 | Et, Et | H, H | H | 5-I | H |
| 2-133 | Et, Et | H, H | H | 5-MeMeIMD | H |
| 2-134 | Et, Et | H, H | H | 5-MeEtIMD | H |
| 2-135 | Et, Et | H, H | H | 5-EtEtIMD | H |
| 2-136 | Et, Et | H, H | H | 5,6-F2 | H |
| 2-137 | Et, Et | H, H | H | 5,6-Cl2 | H |
| 2-138 | Me, CF3 | H, H | H | H | H |
| 2-139 | Me, CF3 | H, H | H | 5-F | H |
| 2-140 | Me, CF3 | H, H | H | 5-Cl | H |
| 2-141 | Me, CF3 | H, H | H | 5-Br | H |
| 2-142 | Me, CF3 | H, H | H | 5-I | H |
| 2-143 | Me, CF3 | H, H | H | 5-MeMeIMD | H |
| 2-144 | Me, CF3 | H, H | H | 5-MeEtIMD | H |
| 2-145 | Me, CF3 | H, H | H | 5-EtEtIMD | H |
| 2-146 | Me, CF3 | H, H | H | 5,6-F2 | H |
| 2-147 | Me, CF3 | H, H | H | 5,6-Cl2 | H |
| 2-148 | Me, CF3CH2 | H, H | H | H | H |
| 2-149 | Me, CF3CH2 | H, H | H | 5-F | H |
| 2-150 | Me, CF3CH2 | H, H | H | 5-Cl | H |
| 2-151 | Me, CF3CH2 | H, H | H | 5-Br | H |
| 2-152 | Me, CF3CH2 | H, H | H | 5-I | H |
| 2-153 | Me, CF3CH2 | H, H | H | 5-MeMeIMD | H |
| 2-154 | Me, CF3CH2 | H, H | H | 5-MeEtIMD | H |
| 2-155 | Me, CF3CH2 | H, H | H | 5-EtEtIMD | H |
| 2-156 | Me, CF3CH2 | H, H | H | 5,6-F2 | H |
| 2-157 | Me, CF3CH2 | H, H | H | 5,6-Cl2 | H |
| 2-158 | Me, Ph | H, H | H | H | H |
| 2-159 | Me, Ph | H, H | H | 5-F | H |
| 2-160 | Me, Ph | H, H | H | 5-Cl | H |

| | | | | | |
|-------|------------|------|---|-----------|---|
| 2-161 | Me, Ph | H, H | H | 5-Br | H |
| 2-162 | Me, Ph | H, H | H | 5-I | H |
| 2-163 | Me, Ph | H, H | H | 5-MeMeIMD | H |
| 2-164 | Me, Ph | H, H | H | 5-MeEtIMD | H |
| 2-165 | Me, Ph | H, H | H | 5-EtEtIMD | H |
| 2-166 | Me, Ph | H, H | H | 5,6-F2 | H |
| 2-167 | Me, Ph | H, H | H | 5,6-Cl2 | H |
| 2-168 | Me, FPh | H, H | H | H | H |
| 2-169 | Me, FPh | H, H | H | 5-F | H |
| 2-170 | Me, FPh | H, H | H | 5-Cl | H |
| 2-171 | Me, FPh | H, H | H | 5-Br | H |
| 2-172 | Me, FPh | H, H | H | 5-I | H |
| 2-173 | Me, FPh | H, H | H | 5-MeMeIMD | H |
| 2-174 | Me, FPh | H, H | H | 5-MeEtIMD | H |
| 2-175 | Me, FPh | H, H | H | 5-EtEtIMD | H |
| 2-176 | Me, FPh | H, H | H | 5,6-F2 | H |
| 2-177 | Me, FPh | H, H | H | 5,6-Cl2 | H |
| 2-178 | Me, ClPh | H, H | H | H | H |
| 2-179 | Me, ClPh | H, H | H | 5-F | H |
| 2-180 | Me, ClPh | H, H | H | 5-Cl | H |
| 2-181 | Me, ClPh | H, H | H | 5-Br | H |
| 2-182 | Me, ClPh | H, H | H | 5-I | H |
| 2-183 | Me, ClPh | H, H | H | 5-MeMeIMD | H |
| 2-184 | Me, ClPh | H, H | H | 5-MeEtIMD | H |
| 2-185 | Me, ClPh | H, H | H | 5-EtEtIMD | H |
| 2-186 | Me, ClPh | H, H | H | 5,6-F2 | H |
| 2-187 | Me, ClPh | H, H | H | 5,6-Cl2 | H |
| 2-188 | Ph, CF3 | H, H | H | H | H |
| 2-189 | Ph, CF3 | H, H | H | 5-F | H |
| 2-190 | Ph, CF3 | H, H | H | 5-Cl | H |
| 2-191 | Ph, CF3 | H, H | H | 5-Br | H |
| 2-192 | Ph, CF3 | H, H | H | 5-MeEtIMD | H |
| 2-193 | Ph, CF3 | H, H | H | 5-EtEtIMD | H |
| 2-194 | ClCH2, FPh | H, H | H | H | H |
| 2-195 | ClCH2, FPh | H, H | H | 5-F | H |
| 2-196 | ClCH2, FPh | H, H | H | 5-Cl | H |
| 2-197 | ClCH2, FPh | H, H | H | 5-Br | H |
| 2-198 | ClCH2, FPh | H, H | H | 5-I | H |
| 2-199 | ClCH2, FPh | H, H | H | 5-MeMeIMD | H |
| 2-200 | ClCH2, FPh | H, H | H | 5-MeEtIMD | H |

| | | | | | |
|-------|--------------------------|------|---|---------------------|---|
| 2-201 | ClCH ₂ , FPh | H, H | H | 5-EtEtIMD | H |
| 2-202 | ClCH ₂ , FPh | H, H | H | 5,6-F ₂ | H |
| 2-203 | ClCH ₂ , FPh | H, H | H | 5,6-Cl ₂ | H |
| 2-204 | ClCH ₂ , ClPh | H, H | H | H | H |
| 2-205 | ClCH ₂ , ClPh | H, H | H | 5-F | H |
| 2-206 | ClCH ₂ , ClPh | H, H | H | 5-Cl | H |
| 2-207 | ClCH ₂ , ClPh | H, H | H | 5-Br | H |
| 2-208 | ClCH ₂ , ClPh | H, H | H | 5-I | H |
| 2-209 | ClCH ₂ , ClPh | H, H | H | 5-MeMeIMD | H |
| 2-210 | ClCH ₂ , ClPh | H, H | H | 5-MeEtIMD | H |
| 2-211 | ClCH ₂ , ClPh | H, H | H | 5-EtEtIMD | H |
| 2-212 | ClCH ₂ , ClPh | H, H | H | 5,6-F ₂ | H |
| 2-213 | ClCH ₂ , ClPh | H, H | H | 5,6-Cl ₂ | H |
| 2-214 | Me, Bn | H, H | H | 5-F | H |
| 2-215 | Me, Bn | H, H | H | 5-Cl | H |
| 2-216 | Me, Bn | H, H | H | 5-Br | H |
| 2-217 | Me, Bn | H, H | H | 5-I | H |
| 2-218 | Me, Bn | H, H | H | 5-MeMeIMD | H |
| 2-219 | Me, Bn | H, H | H | 5-MeEtIMD | H |
| 2-220 | Me, Bn | H, H | H | 5-EtEtIMD | H |
| 2-221 | Me, Bn | H, H | H | 5,6-F ₂ | H |
| 2-222 | Me, Bn | H, H | H | 5,6-Cl ₂ | H |
| 2-223 | cPen | H, H | H | 5-F | H |
| 2-224 | cPen | H, H | H | 5-Cl | H |
| 2-225 | cPen | H, H | H | 5-Br | H |
| 2-226 | cPen | H, H | H | 5-I | H |
| 2-227 | cPen | H, H | H | 5-MeMeIMD | H |
| 2-228 | cPen | H, H | H | 5-MeEtIMD | H |
| 2-229 | cPen | H, H | H | 5-EtEtIMD | H |
| 2-230 | cPen | H, H | H | 5,6-F ₂ | H |
| 2-231 | cPen | H, H | H | 5,6-Cl ₂ | H |
| 2-232 | cHex | H, H | H | 5-F | H |
| 2-233 | cHex | H, H | H | 5-Cl | H |
| 2-234 | cHex | H, H | H | 5-Br | H |
| 2-235 | cHex | H, H | H | 5-I | H |
| 2-236 | cHex | H, H | H | 5-MeMeIMD | H |
| 2-237 | cHex | H, H | H | 5-MeEtIMD | H |
| 2-238 | cHex | H, H | H | 5-EtEtIMD | H |
| 2-239 | cHex | H, H | H | 5,6-F ₂ | H |
| 2-240 | cHex | H, H | H | 5,6-Cl ₂ | H |

| | | | | | | |
|-------|--------|--------|-------------------------|----------------------|---|------|
| 2-241 | Me, Me | H, H | H | H | H | HCl塩 |
| 2-242 | Me, Me | H, H | H | 5-Cl | H | HCl塩 |
| 2-243 | Me, Me | H, H | H | 5-F | H | HCl塩 |
| 2-244 | Me, Et | H, H | H | H | H | HCl塩 |
| 2-245 | Me, Et | H, H | H | 5-Cl | H | HCl塩 |
| 2-246 | Me, Et | H, H | H | 5-F | H | HCl塩 |
| 2-247 | Me, Pr | H, H | H | H | H | HCl塩 |
| 2-248 | Me, Pr | H, H | H | 5-Cl | H | HCl塩 |
| 2-249 | Me, Pr | H, H | H | 5-F | H | HCl塩 |
| 2-250 | Me, Ph | H, H | H | H | H | HCl塩 |
| 2-251 | Me, Ph | H, H | H | 5-Cl | H | HCl塩 |
| 2-252 | Me, Ph | H, H | H | 5-F | H | HCl塩 |
| 2-253 | Me, Me | H, Me | H | H | H | |
| 2-254 | Me, Me | H, Me | H | 5-Cl | H | |
| 2-255 | Me, Me | H, Me | H | 5-F | H | |
| 2-256 | Me, Me | H, Et | H | H | H | |
| 2-257 | Me, Me | H, Et | H | 5-Cl | H | |
| 2-258 | Me, Me | H, Et | H | 5-F | H | |
| 2-259 | Me, Me | H, Pr | H | H | H | |
| 2-260 | Me, Me | H, Pr | H | 5-Cl | H | |
| 2-261 | Me, Me | H, Pr | H | 5-F | H | |
| 2-262 | Me, Me | Me, Me | H | H | H | |
| 2-263 | Me, Me | Me, Me | H | 5-Cl | H | |
| 2-264 | Me, Me | Me, Me | H | 5-F | H | |
| 2-265 | Me, Et | H, Me | H | H | H | |
| 2-266 | Me, Et | H, Me | H | 5-Cl | H | |
| 2-267 | Me, Et | H, Me | H | 5-F | H | |
| 2-268 | Me, Pr | H, Me | H | H | H | |
| 2-269 | Me, Pr | H, Me | H | 5-Cl | H | |
| 2-270 | Me, Pr | H, Me | H | 5-F | H | |
| 2-271 | Me, Ph | H, Me | H | H | H | |
| 2-272 | Me, Ph | H, Me | H | 5-Cl | H | |
| 2-273 | Me, Ph | H, Me | H | 5-F | H | |
| 2-274 | Me, Me | H, H | H | 5-CH ₂ OH | H | |
| 2-275 | Me, Me | H, H | Ac | 5-F | H | |
| 2-276 | Me, Me | H, H | COCH ₂ OMe | 5-F | H | |
| 2-277 | Me, Me | H, H | CH ₂ CH=CHPh | 5-F | H | |
| 2-278 | Me, Me | Me, Me | Me | 5-F | H | |
| 2-279 | Me, Me | O= | H | 5-F | H | |

表 3



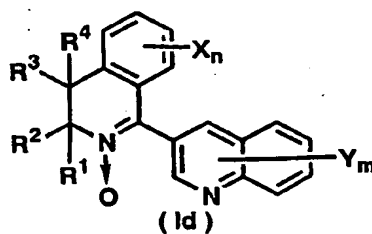
| 化合物番号 | R1, R2 | R3, R4 | Xn | Ym |
|-------|--------|--------|-----|-------|
| 3-1 | Me, Me | H, H | H | H |
| 3-2 | Me, Me | H, H | H | 5-F |
| 3-3 | Me, Me | H, H | H | 6-F |
| 3-4 | Me, Me | H, H | H | 7-F |
| 3-5 | Me, Me | H, H | H | 8-F |
| 3-6 | Me, Me | H, H | H | 5-Cl |
| 3-7 | Me, Me | H, H | H | 6-Cl |
| 3-8 | Me, Me | H, H | H | 7-Cl |
| 3-9 | Me, Me | H, H | H | 8-Cl |
| 3-10 | Me, Me | H, H | H | 2-Me |
| 3-11 | Me, Me | H, H | H | 4-Me |
| 3-12 | Me, Me | H, H | H | 5-Me |
| 3-13 | Me, Me | H, H | H | 6-Me |
| 3-14 | Me, Me | H, H | H | 7-Me |
| 3-15 | Me, Me | H, H | H | 8-Me |
| 3-16 | Me, Me | H, H | H | 8-MeO |
| 3-17 | Me, Me | H, H | H | 2-OH |
| 3-18 | Me, Me | H, H | H | 4-OH |
| 3-19 | Me, Me | H, H | H | 8-OH |
| 3-20 | Me, Me | H, H | 5-F | H |
| 3-21 | Me, Me | H, H | 5-F | 5-F |
| 3-22 | Me, Me | H, H | 5-F | 6-F |
| 3-23 | Me, Me | H, H | 5-F | 7-F |
| 3-24 | Me, Me | H, H | 5-F | 8-F |
| 3-25 | Me, Me | H, H | 5-F | 5-Cl |
| 3-26 | Me, Me | H, H | 5-F | 6-Cl |
| 3-27 | Me, Me | H, H | 5-F | 7-Cl |
| 3-28 | Me, Me | H, H | 5-F | 8-Cl |
| 3-29 | Me, Me | H, H | 5-F | 2-Me |
| 3-30 | Me, Me | H, H | 5-F | 4-Me |
| 3-31 | Me, Me | H, H | 5-F | 5-Me |
| 3-32 | Me, Me | H, H | 5-F | 6-Me |
| 3-33 | Me, Me | H, H | 5-F | 7-Me |

| | | | | |
|------|--------|-------|--------------------|-------|
| 3-34 | Me, Me | H, H | 5-F | 8-Me |
| 3-35 | Me, Me | H, H | 5-F | 8-MeO |
| 3-36 | Me, Me | H, H | 5-F | 2-OH |
| 3-37 | Me, Me | H, H | 5-F | 4-OH |
| 3-38 | Me, Me | H, H | 5-F | 1-OH |
| 3-39 | Me, Me | H, H | 6-F | H |
| 3-40 | Me, Me | H, H | 7-F | H |
| 3-41 | Me, Me | H, H | 8-F | H |
| 3-42 | Me, Me | H, H | 5-Cl | H |
| 3-43 | Me, Me | H, H | 6-Cl | H |
| 3-44 | Me, Me | H, H | 7-Cl | H |
| 3-40 | Me, Me | H, H | 8-Cl | H |
| 3-41 | Me, Me | H, H | 5-Br | H |
| 3-42 | Me, Me | H, H | 5-I | H |
| 3-43 | Me, Me | H, H | 5-Me | H |
| 3-44 | Me, Me | H, H | 6-Me | H |
| 3-45 | Me, Me | H, H | 7-Me | H |
| 3-46 | Me, Me | H, H | 8-Me | H |
| 3-47 | Me, Me | H, H | 5-Et | H |
| 3-48 | Me, Me | H, H | 5-MeO | H |
| 3-49 | Me, Me | H, H | 6-MeO | H |
| 3-50 | Me, Me | H, H | 7-MeO | H |
| 3-51 | Me, Me | H, H | 8-MeO | H |
| 3-52 | Me, Me | H, H | 5-EtO | H |
| 3-53 | Me, Me | H, H | 5,6-F ₂ | H |
| 3-54 | Me, Me | H, H | 6-F,7-Me | H |
| 3-55 | Me, Me | H, H | H | H |
| 3-56 | Me, Me | H, Me | H | H |
| 3-57 | Me, Me | H, Me | H | 5-F |
| 3-58 | Me, Me | H, Me | H | 6-F |
| 3-59 | Me, Me | H, Me | H | 7-F |
| 3-60 | Me, Me | H, Me | H | 8-F |
| 3-61 | Me, Me | H, Me | H | 2-Me |
| 3-62 | Me, Me | H, Me | H | 4-Me |
| 3-63 | Me, Me | H, Me | H | 8-Me |
| 3-64 | Me, Me | H, Me | H | 8-MeO |
| 3-65 | Me, Me | H, Me | 5-F | H |
| 3-66 | Me, Me | H, Me | 5-F | 5-F |
| 3-67 | Me, Me | H, Me | 5-F | 6-F |
| 3-68 | Me, Me | H, Me | 5-F | 7-F |
| 3-69 | Me, Me | H, Me | 5-F | 8-F |
| 3-70 | Me, Me | H, Me | 5-F | 2-Me |
| 3-71 | Me, Me | H, Me | 5-F | 4-Me |
| 3-72 | Me, Me | H, Me | 5-F | 8-Me |
| 3-73 | Me, Me | H, Me | 5-F | 8-MeO |
| 3-74 | Me, Me | H, Me | 6-F | H |

| | | | | |
|-------|--------|--------|--------------------|-------|
| 3-75 | Me, Me | H, Me | 7-F | H |
| 3-76 | Me, Me | H, Me | 8-F | H |
| 3-77 | Me, Me | H, Me | 5-Cl | H |
| 3-78 | Me, Me | H, Me | 6-Cl | H |
| 3-79 | Me, Me | H, Me | 7-Cl | H |
| 3-80 | Me, Me | H, Me | 8-Cl | H |
| 3-81 | Me, Me | H, Me | 5-Me | H |
| 3-82 | Me, Me | H, Me | 6-Me | H |
| 3-83 | Me, Me | H, Me | 7-Me | H |
| 3-84 | Me, Me | H, Me | 8-Me | H |
| 3-85 | Me, Me | H, Me | 5-MeO | H |
| 3-86 | Me, Me | H, Me | 6-MeO | H |
| 3-87 | Me, Me | H, Me | 7-MeO | H |
| 3-88 | Me, Me | H, Me | 8-MeO | H |
| 3-89 | Me, Me | H, Me | 5,6-F ₂ | H |
| 3-90 | Me, Me | H, Me | 6-F,7-Me | H |
| 3-91 | Me, Me | Me, Me | H | H |
| 3-92 | Me, Me | Me, Me | H | 5-F |
| 3-93 | Me, Me | Me, Me | H | 6-F |
| 3-94 | Me, Me | Me, Me | H | 7-F |
| 3-95 | Me, Me | Me, Me | H | 8-F |
| 3-96 | Me, Me | Me, Me | H | 2-Me |
| 3-97 | Me, Me | Me, Me | H | 4-Me |
| 3-98 | Me, Me | Me, Me | H | 8-Me |
| 3-99 | Me, Me | Me, Me | H | 8-MeO |
| 3-100 | Me, Me | Me, Me | 5-F | H |
| 3-101 | Me, Me | Me, Me | 5-F | 5-F |
| 3-102 | Me, Me | Me, Me | 5-F | 6-F |
| 3-103 | Me, Me | Me, Me | 5-F | 7-F |
| 3-104 | Me, Me | Me, Me | 5-F | 8-F |
| 3-105 | Me, Me | Me, Me | 5-F | 2-Me |
| 3-106 | Me, Me | Me, Me | 5-F | 4-Me |
| 3-107 | Me, Me | Me, Me | 5-F | 8-Me |
| 3-108 | Me, Me | Me, Me | 5-F | 8-OH |
| 3-109 | Me, Me | Me, Me | 6-F | H |
| 3-110 | Me, Me | Me, Me | 7-F | H |
| 3-111 | Me, Me | Me, Me | 8-F | H |
| 3-112 | Me, Me | Me, Me | 5-Cl | H |
| 3-113 | Me, Me | Me, Me | 6-Cl | H |
| 3-114 | Me, Me | Me, Me | 7-Cl | H |
| 3-115 | Me, Me | Me, Me | 8-Cl | H |
| 3-116 | Me, Me | Me, Me | 5-Me | H |
| 3-117 | Me, Me | Me, Me | 6-Me | H |
| 3-118 | Me, Me | Me, Me | 7-Me | H |
| 3-119 | Me, Me | Me, Me | 8-Me | H |
| 3-120 | Me, Me | Me, Me | 5-MeO | H |

| | | | | |
|-------|--------|-------------------|--------------------|---|
| 3-121 | Me, Me | Me, Me | 6-MeO | H |
| 3-122 | Me, Me | Me, Me | 7-MeO | H |
| 3-123 | Me, Me | Me, Me | 8-MeO | H |
| 3-124 | Me, Me | Me, Me | 5,6-F ₂ | H |
| 3-125 | Me, Me | Me, Me | 6-F,7-Me | H |
| 3-126 | Me, Me | cPen | H | H |
| 3-127 | cPen | Me, Me | H | H |
| 3-128 | Me, Me | cHex | H | H |
| 3-129 | cHex | Me, Me | H | H |
| 3-130 | Me, Et | H, H | 5-F | H |
| 3-131 | Me, Me | CH ₂ = | 5-F | H |
| 3-132 | Me, Me | H, F | 5-F | H |
| 3-133 | Me, Me | H, Cl | 5-F | H |
| 3-134 | Me, Me | F, F | H | H |
| 3-135 | Me, Me | F, F | 5-F | H |
| 3-136 | Me, Me | H, OH | 5-F | H |
| 3-137 | Me, Me | H, OMe | 5-F | H |
| 3-138 | Me, Me | O= | H | H |
| 3-139 | Me, Me | O= | 5-F | H |
| 3-140 | Me, Me | Me, OH | 5-F | H |
| 3-141 | Me, Me | Et, OH | 5-F | H |
| 3-142 | Me, Me | Me, OMe | 5-F | H |
| 3-143 | Me, Me | Me, OEt | 5-F | H |
| 3-144 | Me, Me | Et, OMe | 5-F | H |

表 4



| 化合物番号 | R1, R2 | R3, R4 | Xn | Ym |
|-------|--------|--------|-----|-------|
| 4-1 | Me, Me | H, H | H | H |
| 4-2 | Me, Me | H, H | H | 5-F |
| 4-3 | Me, Me | H, H | H | 6-F |
| 4-4 | Me, Me | H, H | H | 7-F |
| 4-5 | Me, Me | H, H | H | 8-F |
| 4-6 | Me, Me | H, H | H | 5-Cl |
| 4-7 | Me, Me | H, H | H | 6-Cl |
| 4-8 | Me, Me | H, H | H | 7-Cl |
| 4-9 | Me, Me | H, H | H | 8-Cl |
| 4-10 | Me, Me | H, H | H | 2-Me |
| 4-11 | Me, Me | H, H | H | 4-Me |
| 4-12 | Me, Me | H, H | H | 5-Me |
| 4-13 | Me, Me | H, H | H | 6-Me |
| 4-14 | Me, Me | H, H | H | 7-Me |
| 4-15 | Me, Me | H, H | H | 8-Me |
| 4-16 | Me, Me | H, H | H | 8-MeO |
| 4-17 | Me, Me | H, H | H | 2-OH |
| 4-18 | Me, Me | H, H | H | 4-OH |
| 4-19 | Me, Me | H, H | H | 8-OH |
| 4-20 | Me, Me | H, H | 5-F | H |
| 4-21 | Me, Me | H, H | 5-F | 5-F |
| 4-22 | Me, Me | H, H | 5-F | 6-F |
| 4-23 | Me, Me | H, H | 5-F | 7-F |
| 4-24 | Me, Me | H, H | 5-F | 8-F |
| 4-25 | Me, Me | H, H | 5-F | 5-Cl |
| 4-26 | Me, Me | H, H | 5-F | 6-Cl |
| 4-27 | Me, Me | H, H | 5-F | 7-Cl |
| 4-28 | Me, Me | H, H | 5-F | 8-Cl |
| 4-29 | Me, Me | H, H | 5-F | 2-Me |
| 4-30 | Me, Me | H, H | 5-F | 4-Me |
| 4-31 | Me, Me | H, H | 5-F | 5-Me |
| 4-32 | Me, Me | H, H | 5-F | 6-Me |
| 4-33 | Me, Me | H, H | 5-F | 7-Me |
| 4-34 | Me, Me | H, H | 5-F | 8-Me |
| 4-35 | Me, Me | H, H | 5-F | 8-MeO |

| | | | | |
|------|--------|-------|--------------------|-------|
| 4-36 | Me, Me | H, H | 5-F | 2-OH |
| 4-37 | Me, Me | H, H | 5-F | 4-OH |
| 4-38 | Me, Me | H, H | 5-F | 1-OH |
| 4-39 | Me, Me | H, H | 6-F | H |
| 4-40 | Me, Me | H, H | 7-F | H |
| 4-41 | Me, Me | H, H | 8-F | H |
| 4-42 | Me, Me | H, H | 5-Cl | H |
| 4-43 | Me, Me | H, H | 6-Cl | H |
| 4-44 | Me, Me | H, H | 7-Cl | H |
| 4-40 | Me, Me | H, H | 8-Cl | H |
| 4-41 | Me, Me | H, H | 5-Br | H |
| 4-42 | Me, Me | H, H | 5-I | H |
| 4-43 | Me, Me | H, H | 5-Me | H |
| 4-44 | Me, Me | H, H | 6-Me | H |
| 4-45 | Me, Me | H, H | 7-Me | H |
| 4-46 | Me, Me | H, H | 8-Me | H |
| 4-47 | Me, Me | H, H | 5-Et | H |
| 4-48 | Me, Me | H, H | 5-MeO | H |
| 4-49 | Me, Me | H, H | 6-MeO | H |
| 4-50 | Me, Me | H, H | 7-MeO | H |
| 4-51 | Me, Me | H, H | 8-MeO | H |
| 4-52 | Me, Me | H, H | 5-EtO | H |
| 4-53 | Me, Me | H, H | 5,6-F ₂ | H |
| 4-54 | Me, Me | H, H | 6-F,7-Me | H |
| 4-55 | Me, Me | H, H | H | H |
| 4-56 | Me, Me | H, Me | H | H |
| 4-57 | Me, Me | H, Me | H | 5-F |
| 4-58 | Me, Me | H, Me | H | 6-F |
| 4-59 | Me, Me | H, Me | H | 7-F |
| 4-60 | Me, Me | H, Me | H | 8-F |
| 4-61 | Me, Me | H, Me | H | 2-Me |
| 4-62 | Me, Me | H, Me | H | 4-Me |
| 4-63 | Me, Me | H, Me | H | 8-Me |
| 4-64 | Me, Me | H, Me | H | 8-MeO |
| 4-65 | Me, Me | H, Me | 5-F | H |
| 4-66 | Me, Me | H, Me | 5-F | 5-F |
| 4-67 | Me, Me | H, Me | 5-F | 6-F |
| 4-68 | Me, Me | H, Me | 5-F | 7-F |
| 4-69 | Me, Me | H, Me | 5-F | 8-F |
| 4-70 | Me, Me | H, Me | 5-F | 2-Me |
| 4-71 | Me, Me | H, Me | 5-F | 4-Me |
| 4-72 | Me, Me | H, Me | 5-F | 8-Me |
| 4-73 | Me, Me | H, Me | 5-F | 8-MeO |
| 4-74 | Me, Me | H, Me | 6-F | H |
| 4-75 | Me, Me | H, Me | 7-F | H |
| 4-76 | Me, Me | H, Me | 8-F | H |

| | | | | |
|-------|--------|--------|--------------------|-------|
| 4-77 | Me, Me | H, Me | 5-Cl | H |
| 4-78 | Me, Me | H, Me | 6-Cl | H |
| 4-79 | Me, Me | H, Me | 7-Cl | H |
| 4-80 | Me, Me | H, Me | 8-Cl | H |
| 4-81 | Me, Me | H, Me | 5-Me | H |
| 4-82 | Me, Me | H, Me | 6-Me | H |
| 4-83 | Me, Me | H, Me | 7-Me | H |
| 4-84 | Me, Me | H, Me | 8-Me | H |
| 4-85 | Me, Me | H, Me | 5-MeO | H |
| 4-86 | Me, Me | H, Me | 6-MeO | H |
| 4-87 | Me, Me | H, Me | 7-MeO | H |
| 4-88 | Me, Me | H, Me | 8-MeO | H |
| 4-89 | Me, Me | H, Me | 5,6-F ₂ | H |
| 4-90 | Me, Me | H, Me | 6-F,7-Me | H |
| 4-91 | Me, Me | Me, Me | H | H |
| 4-92 | Me, Me | Me, Me | H | 5-F |
| 4-93 | Me, Me | Me, Me | H | 6-F |
| 4-94 | Me, Me | Me, Me | H | 7-F |
| 4-95 | Me, Me | Me, Me | H | 8-F |
| 4-96 | Me, Me | Me, Me | H | 2-Me |
| 4-97 | Me, Me | Me, Me | H | 4-Me |
| 4-98 | Me, Me | Me, Me | H | 8-Me |
| 4-99 | Me, Me | Me, Me | H | 8-MeO |
| 4-100 | Me, Me | Me, Me | 5-F | H |
| 4-101 | Me, Me | Me, Me | 5-F | 5-F |
| 4-102 | Me, Me | Me, Me | 5-F | 6-F |
| 4-103 | Me, Me | Me, Me | 5-F | 7-F |
| 4-104 | Me, Me | Me, Me | 5-F | 8-F |
| 4-105 | Me, Me | Me, Me | 5-F | 2-Me |
| 4-106 | Me, Me | Me, Me | 5-F | 4-Me |
| 4-107 | Me, Me | Me, Me | 5-F | 8-Me |
| 4-108 | Me, Me | Me, Me | 5-F | 8-MeO |
| 4-109 | Me, Me | Me, Me | 6-F | H |
| 4-110 | Me, Me | Me, Me | 7-F | H |
| 4-111 | Me, Me | Me, Me | 8-F | H |
| 4-112 | Me, Me | Me, Me | 5-Cl | H |
| 4-113 | Me, Me | Me, Me | 6-Cl | H |
| 4-114 | Me, Me | Me, Me | 7-Cl | H |
| 4-115 | Me, Me | Me, Me | 8-Cl | H |
| 4-116 | Me, Me | Me, Me | 5-Me | H |
| 4-117 | Me, Me | Me, Me | 6-Me | H |
| 4-118 | Me, Me | Me, Me | 7-Me | H |
| 4-119 | Me, Me | Me, Me | 8-Me | H |
| 4-120 | Me, Me | Me, Me | 5-MeO | H |
| 4-121 | Me, Me | Me, Me | 6-MeO | H |
| 4-122 | Me, Me | Me, Me | 7-MeO | H |

| | | | | |
|-------|--------|-------------------|--------------------|---|
| 4-123 | Me, Me | Me, Me | 8-MeO | H |
| 4-124 | Me, Me | Me, Me | 5,6-F ₂ | H |
| 4-125 | Me, Me | Me, Me | 6-F,7-Me | H |
| 4-126 | Me, Me | cPen | H | H |
| 4-127 | cPen | Me, Me | H | H |
| 4-128 | Me, Me | cHex | H | H |
| 4-129 | cHex | Me, Me | H | H |
| 4-130 | Me, Et | H, H | 5-F | H |
| 4-131 | Me, Me | CH ₂ = | 5-F | H |
| 4-132 | Me, Me | H, F | 5-F | H |
| 4-133 | Me, Me | H, Cl | 5-F | H |
| 4-134 | Me, Me | F, F | H | H |
| 4-135 | Me, Me | F, F | 5-F | H |
| 4-136 | Me, Me | H, OH | 5-F | H |
| 4-137 | Me, Me | H, OMe | 5-F | H |
| 4-138 | Me, Me | O= | H | H |
| 4-139 | Me, Me | O= | 5-F | H |
| 4-140 | Me, Me | Me, OH | 5-F | H |
| 4-141 | Me, Me | Et, OH | 5-F | H |
| 4-142 | Me, Me | Me, OMe | 5-F | H |
| 4-143 | Me, Me | Me, OEt | 5-F | H |
| 4-144 | Me, Me | Et, OMe | 5-F | H |

上記の例示化合物中、好適な化合物は、化合物番号 1-001、1-007、
 1-019、1-032、1-038、1-041、1-044、1-053、
 1-054、1-056、1-065、1-069、1-085、1-094、
 5 1-095、1-100、1-101、1-106、1-116、1-117、
 1-126、1-137、1-147、1-175、1-185、1-213、
 1-251、1-307、1-345、1-385、1-387、1-424、
 1-464、1-502、1-540、1-578、1-594、1-672、
 1-710、1-720、1-721、1-764、1-790、1-793、
 10 1-796、1-799、1-802、1-804、1-806、1-807、
 1-866、2-001、1-099、1-856、1-857、1-858、
 1-867、1-886、1-904、1-908、1-910、1-912、
 1-913、1-914、1-917、1-918、1-919、1-925、
 1-926、1-927、1-929、1-930、1-935、1-937、
 15 1-938、1-939、2-255、2-264、2-278、3-020、
 3-091、3-100、3-108、3-110、3-126、3-135、

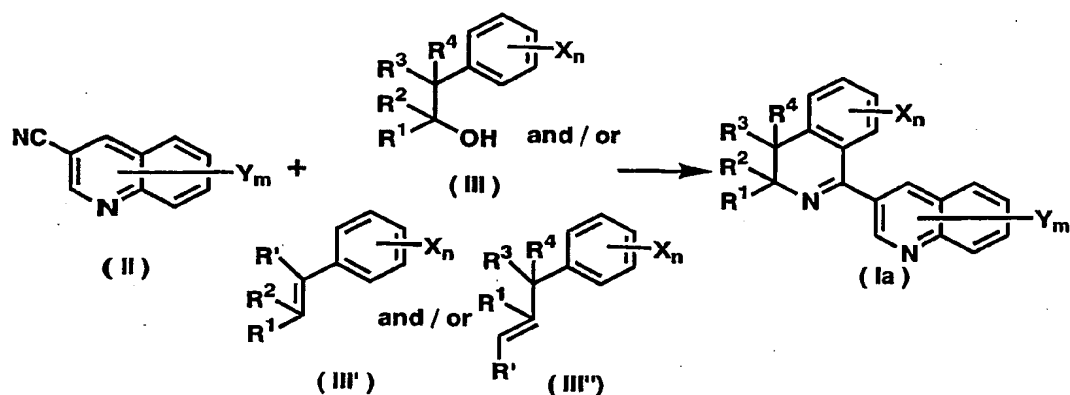
4-020、4-065、4-091、4-100、4-109、4-110、
4-113、4-129、4-134、4-135、2-036又は2-
040番の化合物であり、

より好適には、化合物番号1-032、1-038、1-044、1-054、
5 1-056、1-085、1-116、1-117、1-147、1-185、
1-385、1-387、1-424、1-464、1-502、1-540、
1-594、1-672、1-793、1-804、1-806、1-807、
1-866、1-910、1-912、1-917、1-918、1-919、
1-927、1-929、1-930、2-036、2-040、3-020、
10 3-091、3-100、3-110、3-126、3-135、4-091、
4-100、4-109、4-113、4-129、4-134、又は4-
135番の化合物であり、

更により好適には、化合物番号1-032、1-044、1-056、1-
085、1-117、1-147、1-185、1-387、1-424、1-
15 464、1-502、1-540、1-866、1-910、1-912、1-
917、1-918、1-919、1-927、1-929、1-930、3-
020、3-091、3-100、3-110、3-126、3-135、4-
091、4-100、4-109、4-113、4-129、4-134、又は
4-135番の化合物である。

20 本発明の一般式(I a)の化合物は、以下に記載するA及びB法により、一般
式(I b)の化合物は、以下に記載するC法及びD法により、4-位にケト基、
水酸基、アルコキシ基、ハロゲン原子のある本発明の化合物は、以下に記載する
E法、F法及びG法により、一般式(I c)の化合物は、以下に記載するH法に
より、一般式(I d)の化合物は、以下に記載するI法により製造することがで
25 きる。

(A法)



上式中、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 X 、 n 、 Y 及び m は、前記と同意義を示し、 R' は、水素原子又はアルキル基を示す。

5 A法は、ニトリル(II)と、アルコール(III)および/又はオレフィン(III')および/又はオレフィン(III'')を反応させて、本発明化合物(Ia)を製造する方法である。

(A工程)

10 A工程は、化合物(II)を、溶媒中あるいは非溶媒中、酸の存在下、化合物(III)、化合物(III')および化合物(III'')のうちいずれか1種か、あるいはこれらの混合物と反応することにより、本発明化合物(Ia)を製造する工程である。

15 用いられる化合物(III)、化合物(III')および化合物(III'')の総量は、化合物(II)1モルに対し、通常、1～6モルであり、好適には、1.1～3.0モルである。

20 本工程で溶媒を用いる場合、用いられる溶媒は、反応を阻害しないものであれば特に限定はないが、例えば、ヘキサン、シクロヘキサン、ベンゼン、トルエン、キシレン等の炭化水素類；ジクロロメタン、ジクロロエタン、クロロホルム、四塩化炭素等のハロゲン化炭化水素類；又は、ジオキサン、ジエチルエーテル、テトラヒドロフラン(THF)、ジブチルエーテル等のエーテル類であり得、好適には、炭化水素類、又は、ハロゲン化炭化水素類であり、更に好適には、ベンゼ

ン又はジクロロエタンである。

本工程で用いられる酸は、通常のリッター反応において酸として使用されるものであれば特に限定はないが、例えば、硫酸、蟻酸、リン酸、過塩素酸のような無機酸；ベンゼンスルホン酸、トルエンスルホン酸、トリフルオロメタンスルホン酸のようなスルホン酸；又は、四塩化錫、トリフルオロホウ素のようなルイス酸であり得、好適には、無機酸又はスルホン酸であり、更に好適には、硫酸又はトリフルオロメタンスルホン酸である。

用いられる酸の量は、化合物 (II) 1 モルに対し、通常、1 ～ 20 モルであり、好適には、1. 1 ～ 15 モルである。

反応温度は、原料化合物、反応試薬及び溶媒などにより異なるが、通常、 -20°C ～ 100°C であり、好適には、 0°C ～ 80°C である。

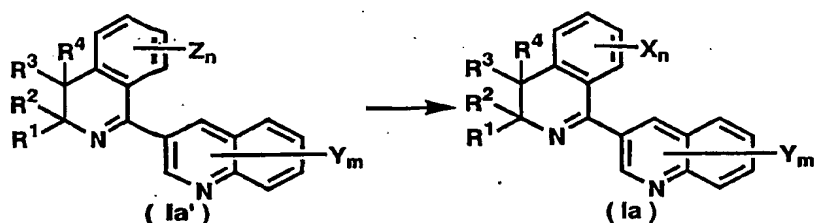
反応時間は、原料化合物、反応試薬、溶媒及び反応温度などにより異なるが、通常、15 分間～120 時間であり、好適には、30 分間～72 時間である。

上記A法の出発原料である3-キノリンカルボニトリル化合物 (II) は公知化合物であるか、又は公知の方法 {例えば、ジャーナル・オブ・メディシナル・ケミストリー J. Med. Chem., 22 巻 816 頁 (1979 年) に記載された方法} に準じて製造することができる。

本工程に使用されるアルコール化合物 (III) は公知化合物であるか、又は公知の方法 {例えば、テトラヘドロン Tetrahedron, 55 巻 4595 頁 (1999 年) に記載された方法} に準じて製造することができる。

本工程に使用されるオレフィン化合物 (III') およびオレフィン化合物 (III'') は公知化合物であるか、又は公知の方法 {例えば、ブレタン・デ・ラ・ソシエテ・キミケ・デ・フランス (Bull. Soc. Chim. Fr.) 2 巻 633 頁 (1935 年) に記載されたように酸でアルコールを脱水する方法、テトラヘドロン・レターズ (Tetrahedron Lett.) 35 巻 4129 頁 (1994 年) やジャーナル・オブ・オーガニック・ケミストリー (J. Org. Chem.) 47 巻 2928 頁 (1982 年) に記載されたようにアルコールに脱離基をつけて脱水する方法} に準じて製造することができる。

(B法)



上式中、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 X 、 n 、 Y 及び m は、前記と同意義を示し、 Z は、臭素、又はヨウ素を示す。

- 5 B法は、本発明化合物（I a'）（ $X=Z$ ）とカップリング反応をすることにより、本発明化合物（I a）を製造する方法である。

(B工程)

- 10 B工程は、化合物（I a'）を、溶媒中、塩基の存在下あるいは非存在下、カップリング化剤と金属触媒の存在下で反応することにより、本発明化合物（I a）を製造する工程である。

- 本工程で用いられるカップリング化剤は、通常のカップリング反応に使用されるものであれば特に限定はないが、例えば、有機マグネシウム、有機亜鉛、有機アルミニウム、有機ジルコニウム、有機錫、有機ホウ素、有機水銀、有機リチウム、有機銅などの有機金属であり得、好適には有機錫、有機ホウ酸エステル、又は有機銅である。

用いられるカップリング化剤の量は、化合物（I a'）1モルに対し、通常、1～6モルであり、好適には、1. 1～3モルである。

- 20 本工程で用いられる金属触媒は、通常のカップリング反応に使用されるものであれば特に限定はないが、例えば、ニッケル、パラジウム、銅、クロムなどの金属塩、又は金属錯体であり得、好適にはニッケルアセチルアセトネート、テトラキストリフェニルフォスフィンパラジウム、又はヨウ化銅である。

- 25 本工程で用いられる溶媒は、反応を阻害しないものであれば特に限定はないが、例えば、ヘキサン、シクロヘキサン、ベンゼン、トルエン、キシレン等の炭化水素類；ジクロロメタン、クロロホルム、四塩化炭素等のハロゲン化炭化水素類；又は、ジオキサン、ジエチルエーテル、テトラヒドロフラン（THF）、ジブチ

ルエーテル等のエーテル類；アセトニトリル、プロピオニトリル等のニトリル類；ジメチルホルムアミド、ジメチルアセトアミド等のようなアミド類であり得、好適には、炭化水素類であり、更に好適には、トルエンである。

本工程で塩基を用いる場合、用いられる塩基は、通常の反応において塩基として使用されるものであれば特に限定はないが、例えば、炭酸ナトリウム、炭酸カリウムのようなアルカリ金属炭酸塩；炭酸水素ナトリウム、炭酸水素カリウムのようなアルカリ金属炭酸水素塩；水酸化ナトリウム、水酸化カリウム、水酸化バリウムのようなアルカリ金属水酸化物若しくはアルカリ土類金属水酸化物；ナトリウムメトキシド、ナトリウムエトキシド、カリウム t -ブトキシドのようなアルカリ金属アルコキシド類；トリエチルアミン、トリブチルアミン、ジイソプロピルエチルアミン、 N -メチルモルホリン、ピリジン、4-(N , N -ジメチルアミノ)ピリジン、 N , N -ジメチルアニリン、 N , N -ジエチルアニリン、1, 5-ジアザビシクロ[4. 3. 0]ノナ-5-エン、1, 4-ジアザビシクロ[2. 2. 2]オクタン(DABCO)、1, 8-ジアザビシクロ[5. 4. 0]-7-ウンデセン(DBU)のような有機塩基類であり得、好適には、アルカリ金属炭酸塩、有機塩基類、又はアルカリ金属水酸化物であり、更に好適には炭酸ナトリウム、ピリジン、トリエチルアミン、又は水酸化ナトリウムである。

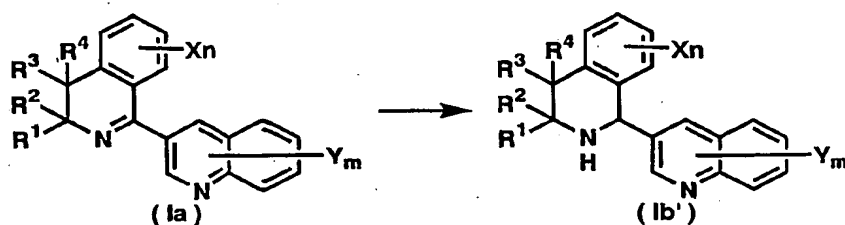
用いられる塩基の量は、化合物(I a') 1モルに対し、通常、1~6モルであり、好適には、1. 1~3モルである。

反応温度は、原料化合物、反応試薬及び溶媒などにより異なるが、通常、0℃~200℃であり、好適には、20℃~180℃である。

反応時間は、原料化合物、反応試薬、溶媒及び反応温度などにより異なるが、通常、1時間~120時間であり、好適には、3時間~72時間である。

上記B法の出発原料である化合物(I a') は上記A法で製造することができる。

(C法)



上式中、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 X 、 n 、 Y 及び m は、前記と同意義を示す。

C法は、本発明化合物 (I a) を還元することにより、本発明化合物 (I b') ($R^5=H$) を製造する方法である。

(C工程)

C工程は、化合物 (I a) を、溶媒中、還元反応により、本発明化合物 (I b') を製造する工程である。

本工程で用いられる還元剤は、イミンを還元するのに使用されるものであれば特に限定はないが、例えば、パラジウム炭素、酸化白金、ラネーニッケル等を触媒とする水素添加反応；亜鉛－酢酸、錫－塩酸のような金属－酸の組み合わせによる反応；水素化リチウムアルミニウム、水素化ホウ素ナトリウム、水素化シアノホウ素ナトリウムのような金属水素化物の反応であり得、好適には、金属水素化物の反応であり、更に好適には、水素化ホウ素ナトリウムである。

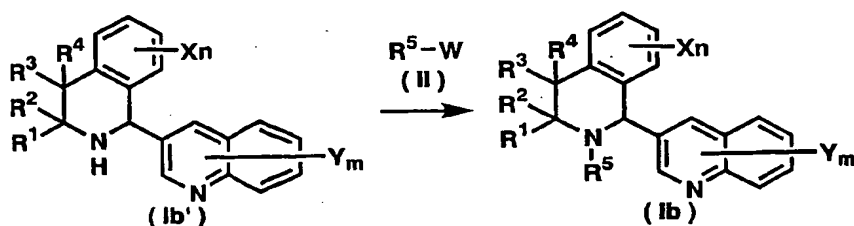
用いられる還元剤の量は、化合物 (I a) 1モルに対し、通常、0.5～20モルであり、好適には、0.5～10モルである。

本工程で溶媒を用いる場合、用いられる溶媒は、反応を阻害しないものであれば特に限定はないが、例えば、ヘキサン、シクロヘキサン、ベンゼン、トルエン、キシレン等の炭化水素類；ジクロロメタン、クロロホルム、四塩化炭素等のハロゲン化炭化水素類；メタノール、エタノール、2-プロパノール等のアルコール類；酢酸、塩酸、硫酸等の酸類；又は、ジオキサン、ジエチルエーテル、テトラヒドロフラン (THF)、ジブチルエーテル等のエーテル類であり得、好適には、アルコール類であり、更に好適には、エタノールである。

反応温度は、原料化合物、反応試薬及び溶媒などにより異なるが、通常、 0°C ～ 200°C であり、好適には、 20°C ～ 180°C である。

反応時間は、原料化合物、反応試薬、溶媒及び反応温度などにより異なるが、通常、1時間～120時間であり、好適には、3時間～72時間である。

(D法)



上式中、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 X 、 n 、 Y 及び m は、前記と同意義を示し、 W は、ハロゲン原子を示す。

D法は、本発明化合物 (I b') ($\text{R}^5=\text{H}$) をアルキル化、または、アシル化することにより、本発明化合物 (I b) を製造する方法である。

(D工程)

D工程は、化合物 (I b') を、溶媒中、塩基の存在下、ハロゲン化アルキルまたは、ハロゲン化アシル (II) により、本発明化合物 (I b) を製造する工程である。

用いられる化合物 (II) の量は、化合物 (I b') 1モルに対し、通常、1～130モルであり、好適には、1.1～10モルである。

本工程で塩基を用いる場合、用いられる塩基は、通常の反応において塩基として使用されるものであれば特に限定はないが、例えば、炭酸ナトリウム、炭酸カリウムのようなアルカリ金属炭酸塩；炭酸水素ナトリウム、炭酸水素カリウムのようなアルカリ金属炭酸水素塩；水素化ナトリウム、水素化リチウム、水素化カリウムのようなアルカリ金属水素化物；水酸化ナトリウム、水酸化カリウム、水酸化バリウムのようなアルカリ金属水酸化物又はアルカリ土類金属水酸化物；ナトリウムメトキシド、ナトリウムエトキシド、カリウム t -ブトキシドのようなアルカリ金属アルコキシド類；トリエチルアミン、トリブチルアミン、ジイソプロピルエチルアミン、 N -メチルモルホリン、ピリジン、4-(N , N -ジメチルアミノ)ピリジン、 N , N -ジメチルアニリン、 N , N -ジエチルアニリン、

1, 5-ジアザビシクロ[4. 3. 0]ノナ-5-エン、1, 4-ジアザビシクロ[2. 2. 2]オクタン (DABCO)、1, 8-ジアザビシクロ[5. 4. 0]-7-ウンデセン (DBU) のような有機塩基類；又は、ブチルリチウム、リチウムジイソプロピルアミドのような有機金属類であり得、好適には、アルカリ金属炭酸塩であり、更に好適には、炭酸カリウムである。

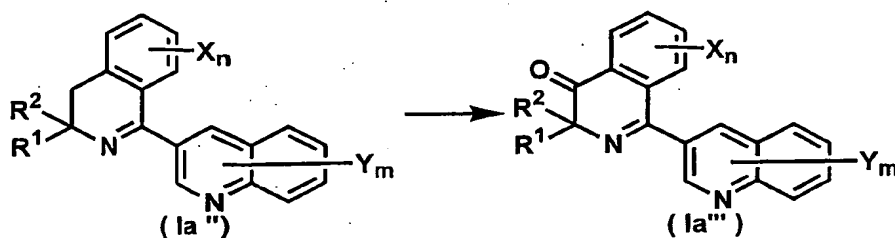
用いられる塩基の量は、化合物 (IV) 1モルに対し、通常、1～3.0モルであり、好適には、1.1～1.0モルである。

本工程で用いられる溶媒は、反応を阻害しないものであれば特に限定はないが、例えば、ヘキサン、シクロヘキサン、ベンゼン、トルエン等の炭化水素類；ジクロロメタン、ジクロロエタン、クロロホルム、テトラクロロエタン等のハロゲン化炭化水素類；ジオキサン、ジエチルエーテル、テトラヒドロフラン (THF)、エチレングリコールジメチルエーテル等のエーテル類；ジメチルホルムアミド、ジメチルアセトアミド、ヘキサメチルリン酸トリアミド (HMPA) 等のアミド類；アセトン、メチルエチルケトン、メチルイソブチルケトン、シクロヘキサノン等のケトン類；アセトニトリル、イソブチロニトリル等のニトリル類；又は、酢酸メチル、酢酸エチル、酢酸プロピル等のエステル類であり得、好適には、ケトン類であり、更に好適には、アセトンである。

反応温度は、原料化合物、反応試薬及び溶媒などにより異なるが、通常、-20℃～150℃であり、好適には、0℃～40℃である。

反応時間は、原料化合物、反応試薬、溶媒及び反応温度などにより異なるが、通常、10分間～120時間であり、好適には、30分間～72時間である。

(E法)



上式中、 R^1 、 R^2 、 X 、 n 、 Y 、 m は、前記と同意義を示す。

E法は、本発明化合物 (Ia'') を酸化して、本発明化合物 (Ia''') を製造

する方法である。

(E工程)

E工程は、化合物 (I a'') を、溶媒中あるいは非溶媒中、酸化剤と反応することにより、本発明化合物 (I a''') を製造する工程である。

- 5 本工程で溶媒を用いる場合、用いられる溶媒は、反応を阻害しないものであれば特に限定はないが、例えば、蟻酸、酢酸等の有機酸類；ヘキサン、シクロヘキサン、ベンゼン、トルエン、キシレン等の炭化水素類；ジクロロメタン、ジクロロエタン、クロロホルム、四塩化炭素等のハロゲン化炭化水素類；又は、ジオキサン、ジエチルエーテル、テトラヒドロフラン (THF)、ジブチルエーテル等
10 のエーテル類であり得、好適には、有機酸類、又は、炭化水素類であり、更に好適には、酢酸である。

- 本工程で用いられる酸化剤は、通常の酸化反応において活性メチレンをカルボニル基に酸化することに使用されるものであれば特に限定はないが、例えば、過マンガン酸カリウム、過マンガン酸バリウム等の過マンガン酸塩類；酸化クロム、
15 二クロム酸塩、クロム酸塩、酸化クロミル、クロム酸エステル等のクロム酸類；四酸化ルテニウム、二酸化セレン等の金属酸化類であり得、好適にはクロム酸塩類であり、更に好適には酸化クロムである。

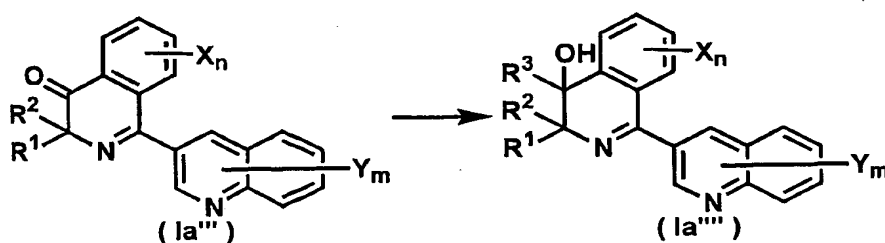
 用いられる酸化剤の量は、化合物 (II) 1モルに対し、通常、1～20モルであり、好適には、1. 1～15モルである。

- 20 反応温度は、原料化合物、反応試薬及び溶媒などにより異なるが、通常、0℃～200℃であり、好適には、10℃～150℃である。

 反応時間は、原料化合物、反応試薬、溶媒及び反応温度などにより異なるが、通常、15分間～120時間であり、好適には、30分間～72時間である。

- 上記E法の出発原料である化合物 (I a'') は上記A法または、B法で製造
25 することができる。

(F法)



上式中、 R^1 、 R^2 、 X 、 n 、 Y 、 m は、前記と同意義を示し、 R^3 は、水素原子、又は、ハロゲン原子、 $C_1 \sim C_6$ アルコキシ基、 $C_1 \sim C_6$ アルキルチオ基及びフェノキシ基からなる群から選ばれる同一若しくは異なった1～3個の置換基で置換されてよい $C_1 \sim C_6$ アルキル基を示す。

F法は、本発明化合物（I a'''）に求核反応をすることにより、本発明化合物（I a'''）を製造する方法である。

(F工程)

F工程は、溶媒中、化合物（I a'''）のカルボニル基に対して、求核剤を反応することにより、本発明化合物（I a'''）を製造する工程である。

本工程で用いられる求核剤は、通常の求核反応に使用されるものであれば特に限定はないが、例えば、水素化リチウムアルミニウム、水素化ホウ素ナトリウム等の金属水素化物；グリニャール試薬、レフォマトスキー試薬、ブチリチウム、銅アセチリド等の有機金属化合物であり得、好適には水素化ホウ素ナトリウム、又は、塩素化メチルマグネシウムである。

用いられる求核剤の量は、化合物（I a'''）1モルに対し、通常、1～6モルであり、好適には、1.1～3モルである。

本工程で用いられる溶媒は、反応を阻害しないものであれば特に限定はないが、例えば、ヘキサン、シクロヘキサン、ベンゼン、トルエン、キシレン等の炭化水素類；ジクロロメタン、クロロホルム、四塩化炭素等のハロゲン化炭化水素類；メタノール、エタノール、2-プロパノール等のアルコール類；酢酸、塩酸、硫酸等の酸類；又は、ジオキサン、ジエチルエーテル、テトラヒドロフラン（THF）、ジブチルエーテル等のエーテル類であり得、好適には、アルコール類、又は、エーテル類であり、更に好適には、メタノール、又は、ジエチルエーテルで

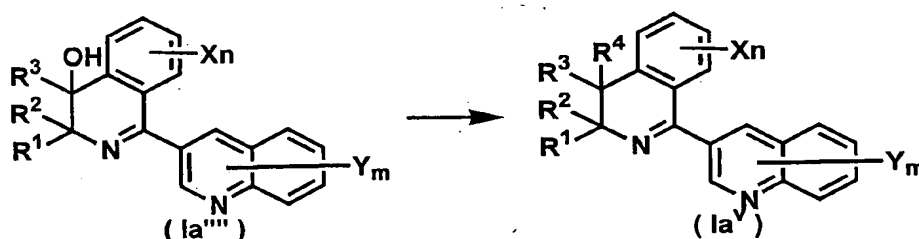
ある。

反応温度は、原料化合物、反応試薬及び溶媒などにより異なるが、通常、 -20°C ～ 200°C であり、好適には、 0°C ～ 180°C である。

反応時間は、原料化合物、反応試薬、溶媒及び反応温度などにより異なるが、通常、0.5時間～120時間であり、好適には、1時間～72時間である。

上記F法の出発原料である化合物(I a''')は上記E法で製造することができる。

(G法)



上式中、 R^1 、 R^2 、 X 、 n 、 Y 、 m は、前記と同意義を示し、 R^3 は、水素原子、又は、ハロゲン原子、 $C_1\sim C_6$ アルコキシ基、 $C_1\sim C_6$ アルキルチオ基及びフェノキシ基からなる群から選ばれる同一若しくは異なった1～3個の置換基で置換されてよい $C_1\sim C_6$ アルキル基を示し、 R^4 は、ハロゲン原子を示す。

G法は、本発明化合物(I a''')の水酸基をハロゲン化することにより、本発明化合物(I a')を製造する方法である。

(G工程)

G工程は、化合物(I a''')を、溶媒中、ハロゲン化反応により、本発明化合物(I a')を製造する工程である。

本工程で用いられるハロゲン化剤は、ハロゲン化するのに使用されるものであれば特に限定はないが、例えば、フッ素化剤としては、四フッ化硫黄、三フッ化ジェチルアミノ硫黄(DAST)、三フッ化モルホリノ硫黄等のフッ化硫黄類であり得、塩素化・臭素化剤としては、塩化亜鉛、硫酸、臭化リチウム等の触媒下のハロゲン化水素；三ハロゲン化リン、五ハロゲン化リン、オキシハロゲン化リン等のハロゲン化リン化合物；トリフェニルフォスフィンとテトラハロゲン化炭素、トリフェニルフォスフィンジハライド等のハロゲン化フォスフィン化合物；ハロ

ゲン化チオニルであり得、好適にはフッ素化剤としては、DAST であり、塩素化・臭素化剤としては、三ハロゲン化リンである。

用いられるハロゲン化剤の量は、化合物 (I a^{'''}) 1 モルに対し、通常、0.5～20 モルであり、好適には、1～10 モルである。

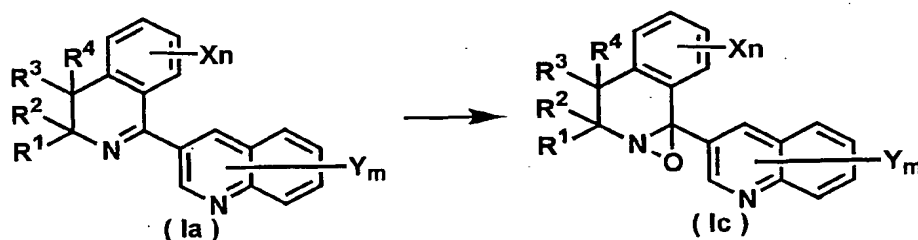
- 5 本工程で用いられる溶媒は、反応を阻害しないものであれば特に限定はないが、例えば、ヘキサン、シクロヘキサン、ベンゼン、トルエン等の炭化水素類；ジクロロメタン、ジクロロエタン、クロロホルム、テトラクロロエタン等のハロゲン化炭化水素類；ジオキサン、ジエチルエーテル、テトラヒドロフラン (THF)、エチレングリコールジメチルエーテル等のエーテル類；ジメチルホルムアミド、ジメチルアセトアミド、ヘキサメチルリン酸トリアミド (HMPA) 等のアミド類；アセトン、メチルエチルケトン、メチルイソブチルケトン、シクロヘキサノン等のケトン類；アセトニトリル、イソブチロニトリル等のニトリル類；又は、酢酸メチル、酢酸エチル、酢酸プロピル等のエステル類であり得、好適には、炭
- 10 化水素類、又は、ハロゲン化炭化水素類であり、更に好適には、トルエン、又は、塩化メチレンである。
- 15

反応温度は、原料化合物、反応試薬及び溶媒などにより異なるが、通常、 -20°C ～ 150°C であり、好適には、 0°C ～ 80°C である。

反応時間は、原料化合物、反応試薬、溶媒及び反応温度などにより異なるが、通常、10分間～120時間であり、好適には、30分間～72時間である。

- 20 上記G法の出発原料である化合物 (I a^{'''}) は上記F法で製造することができる。

(H法)



上式中、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 X 、 n 、 Y 、 m は、前記と同意義を示す。

- 25 H法は、本発明化合物 (I a) を酸化して、本発明化合物 (I c) を製造する

方法である。

(H工程)

H工程は、化合物(I a)を、溶媒中あるいは非溶媒中、酸化剤と反応することにより、本発明化合物(I c)を製造する工程である。

- 5 本工程で溶媒を用いる場合、用いられる溶媒は、反応を阻害しないものであれば特に限定はないが、例えば、蟻酸、酢酸等の有機酸類；ヘキサン、シクロヘキサン、ベンゼン、トルエン、キシレン等の炭化水素類；ジクロロメタン、ジクロロエタン、クロロホルム、四塩化炭素等のハロゲン化炭化水素類；メタノール、エタノール、2-プロパノール等のアルコール類；又は、ジオキサン、ジエチル
10 エーテル、テトラヒドロフラン(THF)、ジブチルエーテル等のエーテル類であり得、好適には、アルコール類、又は、炭化水素類であり、更に好適には、メタノールである。

- 本工程で用いられる酸化剤は、通常のイミンをオキサゾリジンに酸化する反応
15 において使用されるものであれば特に限定はないが、例えば、メタクロロ過安息香酸、パラニトロ過安息香酸、モノペルオキシフタル酸等の過安息香酸類；トリフルオロ過酢酸、過酢酸、過蟻酸等の過酸類；ジメチルジオキソラン等の過酸化
物類；金属触媒下のt-ブチルヒドロペルオキシド、t-アミルヒドロペルオキシド、過酸化水素等のヒドロペルオキシド類であり得、好適には、過安息香酸類、
20 過酸類、又は、ヒドロペルオキシド類であり、更に好適にはメタクロロ過安息香酸、又は、過酢酸である。

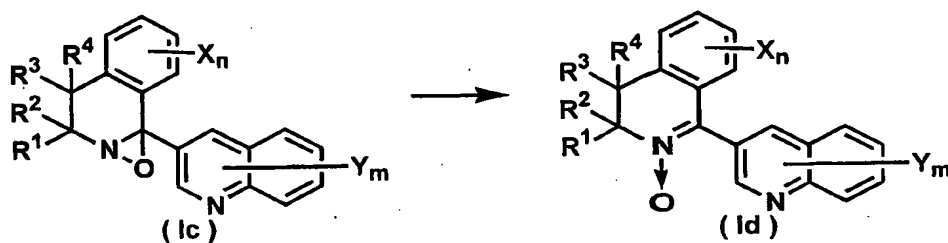
用いられる酸化剤の量は、化合物(I a) 1モルに対し、通常、1～20モルであり、好適には、1.1～15モルである。

反応温度は、原料化合物、反応試薬及び溶媒などにより異なるが、通常、
0℃～200℃であり、好適には、10℃～150℃である。

- 25 反応時間は、原料化合物、反応試薬、溶媒及び反応温度などにより異なるが、通常、15分間～120時間であり、好適には、30分間～72時間である。

上記H法の出発原料である化合物(I a)は上記A法、B法、C法、D法、E法、F法およびG法で製造することができる。

(I 法)



上式中、 R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 X 、 n 、 Y 、 m は、前記と同意義を示す。

I 法は、本発明化合物 (I c) を酸で処理して、本発明化合物 (I d) を製造
5 する方法である。

(I 工程)

I 工程は、化合物 (I c) を、溶媒中あるいは非溶媒中、酸で処理することにより、本発明化合物 (I d) を製造する工程である。

本工程で溶媒を用いる場合、用いられる溶媒は、反応を阻害しないものであれば特に限定はないが、例えば、ヘキサン、シクロヘキサン、ベンゼン、トルエン、
10 キシレン等の炭化水素類；ジクロロメタン、ジクロロエタン、クロロホルム、四塩化炭素等のハロゲン化炭化水素類；又は、ジオキサン、ジエチルエーテル、テトラヒドロフラン (THF)、ジブチルエーテル等のエーテル類であり得、好適には、ハロゲン化炭化水素類であり、更に好適には、クロロホルムである。

本工程で用いられる酸は、特に限定はないが、例えば、硫酸、蟻酸、リン酸、過塩素酸のような無機酸；ベンゼンスルホン酸、トルエンスルホン酸、トリフル
15 オロメタンスルホン酸のようなスルホン酸；又は、四塩化錫、トリフルオロホウ素のようなルイス酸であり得、好適には、無機酸、又は、スルホン酸であり、更に好適には、硫酸、又は、メタンスルホン酸である。

用いられる酸の量は、化合物 (I c) 1 モルに対し、通常、1 ~ 20 モルであり、好適には、1.1 ~ 1.5 モルである。

反応温度は、原料化合物、反応試薬及び溶媒などにより異なるが、通常、
20 20 °C ~ 100 °C であり、好適には、0 °C ~ 80 °C である。

反応時間は、原料化合物、反応試薬、溶媒及び反応温度などにより異なるが、
25 通常、15 分間 ~ 120 時間であり、好適には、30 分間 ~ 72 時間である。

上記 I 法の出発原料である化合物 (I c) は上記 H 法で製造することができる。

上記各反応終了後、各反応の目的化合物は、常法に従って反応混合物から採取することができる。例えば、反応混合物を適宜中和し、又、不溶物が存在する場合には濾過により除去した後、水と酢酸エチルのような混和しない有機溶媒を加え、水洗後、目的化合物を含む有機層を分離し、無水硫酸マグネシウム等で乾燥後、溶剤を留去することによって得られる。

得られた目的化合物は、必要ならば、常法、例えば再結晶、再沈殿又はクロマトグラフィー等によって更に精製できる。

本発明の化合物 (I a)、(I b)、(I c) 又は (I d) の塩を製造する工程は、各工程で製造した化合物 (I a)、(I b)、(I c) 又は (I d) を含む反応混合物の抽出濃縮物、又は、化合物 (I a)、(I b)、(I c) 又は (I d) を適当な溶媒に溶解させた液に酸を加えることによって行われる。

反応に使用される酸は、フッ化水素酸、塩酸、臭化水素酸、ヨウ化水素酸のようなハロゲン化水素酸、硝酸、過塩素酸、硫酸、リン酸等の無機酸；メタンスルホン酸、トリフルオロメタンスルホン酸、エタンスルホン酸のような低級アルキルスルホン酸、ベンゼンスルホン酸、p-トルエンスルホン酸のようなアリールスルホン酸、コハク酸、シュウ酸等の有機酸塩；及びサッカリンのような有機酸アミド化合物を挙げることができる。

酸は、通常 1 当量乃至 10 当量用いられ、好適には 1 当量乃至 5 当量である。

反応に使用される溶媒は、本反応を阻害しない限り特に限定は無いが、好適には、エーテル、ジイソプロピルエーテル、テトラヒドロフラン (THF)、ジオキサン等のエーテル類、メタノール、エタノール等のアルコール類を挙げることができる。

反応温度は、 -20°C ～ 50°C であり、好適には -10°C ～ 30°C である。

反応時間は、用いられる溶媒の種類及び温度などにより異なるが、通常 10 分間～1 時間である。

生成した塩は常法によって単離される。即ち、結晶として析出する場合は濾取によって、水溶性の場合には、有機溶媒と水との分液によって水溶液として単離される。

本発明化合物は、有害生物防除剤の有効成分として有用である。例えば農園芸用殺菌剤としては各種の植物病原菌によって引き起こされる病害に対し優れた防除効果を示す。特にイネいもち病、穂枯病、アズキ、トマト、キュウリ及びインゲンの灰色かび病、菌核病、タマネギ白斑葉枯病、コムギの雪腐病、うどんこ病、リンゴのモニリア病、斑点落葉病、茶のたんそ病、ナシの赤星病、黒斑病、ブドウの黒とう病、カンキツの黒点病等の各種病害などに対して優れた防除効果を示す。本発明化合物は優れた治療効果を有することから感染後の処理による病害防除が可能である。

本発明化合物の使用に際しては、従来の農薬製剤の場合と同様に、補助剤と共に、乳剤、粉剤、水和剤、液剤、粒剤、懸濁製剤などの種々の形態に製剤することができる。これらの製剤の実際の使用に際しては、そのまま使用するか、又は水などの希釈剤で所定濃度に希釈して使用することができる。

用いられる補助剤としては、担体、乳化剤、懸濁剤、分散剤、展着剤、浸透剤、湿潤剤、増粘剤、安定剤などが挙げられ、必要に応じ適宜添加することができる。

用いられる担体は、固体担体と液体担体に分けられ、固体担体は、澱粉、砂糖、セルロース粉、シクロデキストリン、活性炭、大豆粉、小麦粉、もみがら粉、木粉、魚粉、粉乳などの動植物性粉末；又は、タルク、カオリン、ベントナイト、有機ベントナイト、炭酸カルシウム、硫酸カルシウム、重炭酸ナトリウム、ゼオライト、珪藻土、ホワイトカーボン、クレー、アルミナ、シリカ、硫黄粉末などの鉱物性粉末などであり得、液体担体は、水；大豆油、棉実油、トウモロコシ油などの動植物油；エチルアルコール、エチレングリコールなどのアルコール類；アセトン、メチルエチルケトンなどのケトン類；ジオキサン、テトラヒドロフランなどのエーテル類；ケロシン、灯油、流動パラフィン、キシレン、トリメチルベンゼン、テトラメチルベンゼン、シクロヘキサン、ソルベントナフサなどの脂肪族／芳香族炭化水素類；クロロホルム、クロロベンゼンなどのハロゲン化炭化水素類；ジメチルホルムアミドなどの酸アミド類；酢酸エチルエステル、脂肪酸のグリセリンエステルなどのエステル類；アセトニトリルなどのニトリル類；ジメチルスルホキシドなどの含硫化合物類；又は、N-メチルピロリドンなどであり得る。

本発明化合物と補助剤との配合質量比は、通常0.05:99.95~90:10であり、好適には0.2:99.8~80:20である。

本発明化合物の使用濃度又は使用量は、対象作物、使用方法、製剤形態、施用量などの違いによって異なるが、茎葉処理の場合、有効成分当たり普通0.1~10000ppmであり、好適には1~1000ppmであり、土壌処理の場合には、普通10~100000g/haであり、好適には100~10000g/haである。

本発明化合物は必要に応じて他の農薬、例えば殺虫剤、殺ダニ剤、誘引剤、殺線虫剤、殺菌剤、抗ウイルス剤、除草剤、植物生長調整剤などと混用又は併用することができ、好適には、殺虫剤、殺ダニ剤、殺線虫剤又は殺菌剤である。

用いられる殺虫剤は、例えばO, O-ジエチル O- (5-フェニル-3-イソキサゾリル) ホスホロチオエート (一般名: イソキサチオン)、O, O-ジメチル-O- (3-メチル-4-ニトロフェニル) チオホスフェート (一般名: フェニトロチオン)、O, O-ジエチル O- (2-イソプロピル-4-メチルピリミジン-6-イル) チオホスフェート (一般名: ダイアジノン)、O, S-ジメチル N-アセチルホスホロアミドチオエート (一般名: アセフェート)、O, O-ジメチル S-1, 2-ジエトキシカルボニルエチル ジチオホスフェート (一般名: マラチオン) のような有機リン酸エステル系化合物;

2-tert-ブチルイミノ-3-イソプロピル-5-フェニル-3, 4, 5, 6-テトラヒドロ-2H-1, 3, 5-チアジアジン-4-オン (一般名: ププロフェジン)、1-ナフチル N-メチルカーバメート (一般名: カルバリル)、2-イソプロポキシフェニル N-メチルカーバメート (一般名: プロボキシル)、S-メチル N- (メチルカルバモイルオキシ) チオアセトイミデート (一般名: メソミル)、N, N-ジメチル-2-メチルカルバモイルオキシイミノ-2- (メチルチオ) アセトアミド (一般名: オキサミル) のようなカーバメート系化合物;

(RS) - α -シアノ-3-フェノキシベンジル= (RS) -2- (4-クロロフェニル) -3-メチルブチレート (一般名: フェンバレレート)、3-フェノキシベンジル= (1RS, 3RS) - (1RS, 3SR) -3- (2, 2-ジク

ロロビニル) - 2, 2-ジメチルシクロプロパンカルボキシレート (一般名: パーメスリン)、2- (4-エトキシフェニル) - 2-メチルプロピル 3-フェノキシベンジル エーテル (一般名: エトフェンブロックス) のようなピレスロイド系化合物;

5 1- [3, 5-ジクロロ-4- (3-クロロ-5-トリフルオロメチル-2-ピリジルオキシ) フェニル] -3- (2, 6-ジフルオロベンゾイル) ウレア (一般名: クロルフルアズロン)、1- (3, 5-ジクロロ-2, 4-ジフルオロフェニル) -3- (2, 6-ジフルオロベンゾイル) ウレア (一般名: テフルベンズロン) のようなベンゾイルウレア系化合物;

10 1- (6-クロロ-3-ピリジルメチル) -N-ニトロ-イミダゾリジン-2-イリデンアミン (一般名: イミダクロプリド)、[C (E)] -N- [(2-クロロ-5-チアジニル) メチル] -N'-メチル-ニトログアニジン (一般名: クロチアニジン) のようなネオニコチノイド系化合物;

15 5-アミノ-1- [2, 6-ジクロロ-4- (トリフルオロメチル) フェニル] -4- [(トリフルオロメチル) スルフィニル] -1-1H-ピラゾール-3-カルボニトリル (一般名: フィプロニル) のようなピラゾール系化合物であり得る。

用いられる殺菌剤は、例えば、マンガニーズ エチレンビス (ジチオカーバメート) (一般名: マンネブ)、ジンクアンドマンガニーズ エチレンビス (ジチオカーバメート) (一般名: マンゼブ)、3, 3-エチレンビス (テトラヒドロ-
20 4, 6-ジメチル-2H-1, 3, 5-チアジアジン-2-チオン (一般名: ミルネブ) のようなジチオカーバメート系化合物;

N- (トリクロロメチルチオ) シクロヘキシ-4-エン-1, 2-ジカルボキシミド (一般名: キャプタン)、N- (1, 1, 2, 2-テトラクロロエチルチオ) シクロヘキシ-4-エン-1, 2-ジカルボキシミド (一般名: キャプタホル)、
25 のようなN-ハロゲノアルキルチオイミド系化合物;

4, 5, 6, 7-テトラクロロフタリド (一般名: フサライド)、テトラクロロイソフタロニトリル (一般名: クロロタロニル) のようなハロゲノ芳香族系化合物;

メチル 1- (ブチルカルバモイル) -2-ベンズイミダゾールカーバメート

(一般名：ベノミル) のようなベンズイミダゾール系化合物；

(E) - 4-クロロ- α , α , α -トリフルオロ-N-(1-イミダゾール-1-イル-2-プロポキシエチルデン) - o-トルイジン (一般名：トリフルミゾール)、2-(4-クロロフェニル) - 2-(1H-1, 2, 4-トリアゾール-1-イルメチル) ヘキサンニトリル (一般名：マイクロブタニル)、N-プロピル-N-{2-(2, 4, 6-トリクロロフェノキシ) エチル} イミダゾール-1-カルボキサミド (一般名：プロクロラズ)、2-(4-フルオロフェニル) - 1-(1H-1, 2, 4-トリアゾール-1-イル) - 3-トリメチルシリルプロパン-2-オール (一般名：シメコナゾール) のようなアゾール系化合物；

3-クロロ-N-(3-クロロ-2, 6-ジニトロ-4- α , α , α -トリフルオロトリル) - 5-トリフルオロメチル-2-ピリジナミン (一般名：フルアジナム) のようなピリジンアミン系化合物；

1-(2-シアノ-2-メトキシイミノアセチル) - 3-エチル尿素 (一般名：シモキサニル) のようなシアノアセトアミド系化合物；

メチル N-(2-メトキシアセチル) - N-(2, 6-キシリル) -DL-アラニネート (一般名：メタラキシル)、2-メトキシ-N-(2-オキソ-1, 3-オキサゾリジン-3-イル) アセト-2', 6'-キシリジド (一般名：オキサジキシル) メチル N-フェニルアセチル-N-(2, 6-キシリル) -DL-アラニネート (一般名：ベナラキシル) のようなフェニルアミド系化合物；

N-(3, 5-ジクロロフェニル) - 1, 2-ジメチルシクロプロパン-1, 2-ジカルボキシミド (一般名：プロシミドン)、3-(3, 5-ジクロロフェニル) - N-イソプロピル-2, 4-ジオキソイミダゾリジン-1-カルボキサミド (一般名：イプロジオン)、3-(3, 5-ジクロロフェニル) - 5-メチル-5-ビニル-2, 4-オキサゾリジノン (一般名：ピンクロゾリン) のようなジカルボキシイミド系化合物；

水酸化第二銅 (一般名：水酸化第二銅)、銅 8-キノリノレート (一般名：キノリン銅) のような銅系化合物；

3-ヒドロキシ-5-メチルイソオキサゾール (一般名: ヒメキサゾール) のようなイソキサゾール系化合物;

アルミニウムトリス (エチルホスホネート) (一般名: ホセチルアルミニウム)、
O-2, 6-ジクロロ-p-トリル=O, O-ジメチルホスホロチオエート (一
般名: トルクロホスメチル)、S-ベンジル O, O-ジイソプロピルホスホロチ
オエート、O-エチル S, S-ジフェニルホスホロジチオエート、アルミニウ
ムエチルハイドロゲンホスホネートのような有機リン系化合物;

α , α , α -トリフルオロ-3'-イソプロポキシ- α -トルアニリド (一般
名: フルトラニル)、3'-イソプロポキシ- α -トルアニリド (一般名: メプ
ロニル) のようなベンズアニリド系化合物;

(E, Z) 4- {3- (4-クロロフェニル) -3- (3, 4-ジメトキシフェ
ニル) アクリロイル} モリフォリン (一般名: ジメトモルフ)、(±)-シス-
4- {3- (4-t-ブチルフェニル) -2-メチルプロピル} -2, 6-ジメ
チルモリフォリン (一般名: フェンプロピモルフ)、(±)-シス-4- {3-
(4-t-ブチルフェニル) -2-メチルプロピル} -2, 6-ジメチルモル
フォリン (一般名: フェンプロピモルフ) のようなモリフォリン系化合物;

1, 1-イミノジ (オクタメチレン) ジグアニジニウム トリアセテート (一般
名: イミノクタジン) のようなイミノクタジン系化合物;

1, 2, 5, 6-テトラヒドロ-4H-ピロロ[3, 2, 1-ij]キノリン-
4-オン (一般名: ピロキロン)、4, 5, 6, 7-テトラクロロフサライド
(一般名: フサライド)、2, 2-ジクロロ-N-[1- (4-クロロフェニル)
エチル]-1-エチル-3-メチルシクロプロパンカルボキサミド (一般名: カ
ルプロパミド) のようなメラニン生合成阻害剤;

1, 2, 5, 6-テトラヒドロ-3-アリルオキシ-1, 2-ベンズイソチア
ゾール-1, 1-ジオキサイド (一般名: プロベナゾール) のような抵抗性誘導
剤;

硫黄剤、錫剤であり得る。

実施例

以下に、実施例、製剤例及び試験例を挙げて本発明化合物を具体的に説明するが、本発明はこれらに限定されるものではない。

実施例 1

5 6'-メチル-1'-キノリン-3-イル-4'-H-スピロ [シクロヘキサ
ン-1, 3'-イソキノリン] (化合物番号 1-772 番) (A 工程)

キノリン-3-カルボニトリル (154 mg、1.0 ミリモル) のベンゼン
(1.0 mL) 溶液に、氷冷下、硫酸 (0.4 mL) 及び 1-(3-メチルベン
10 ジル) シクロヘキサノール (204 mg、1.0 ミリモル) を加え、80℃で
1 時間攪拌した後、水に注加し、酢酸エチルで抽出して得られた残渣をクロマト
グラフィーに付し、目的物 180 mg (収率 73%) を得た。

物性：油状物。

¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.51-1.85 (10H, m), 2.40 (3H, s), 2.81 (2H,
s), 7.02-7.14 (3H, m), 7.57 (1H, t, J=8.4Hz), 7.75 (1H, t, J=8.4Hz),
15 7.86 (1H, d, J=8.4Hz), 8.15 (1H, d, J=8.4Hz), 8.36 (1H, s), 9.16 (1H, s).
MS m/z : 340 (M⁺), 325, 311, 297, 284, 244, 142, 128.

実施例 2

3-(5-フルオロ-3,3-ジメチル-3,4-ジヒドロイソキノリン-
1-イル) キノリン (化合物番号 1-32 番) (A 工程)

20 1-フルオロ-(2-メチルプロペン-1-イル) ベンゼンと 1-フルオロ-
(2-メチルプロペン-2-イル) ベンゼンの約 4 対 7 の混合物 (87.3 mg、
0.58 ミリモル) 及びキノリン-3-カルボニトリル (89.6 mg、
0.58 ミリモル) のジクロロエタン (0.58 mL) 溶液に、氷冷下、トリフ
ルオロメタンスルホン酸 (0.52 mL) を加え、室温で 18 時間攪拌した後、
25 水に注加し、酢酸エチルで抽出して得られた残渣をクロマトグラフィーに付し、
目的物 82.2 mg (収率 47%) を得た。

融点：97~100℃。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.36 (6H, s), 2.89 (2H, s), 7.03 (1H, dd,
J=1.4, 6.9Hz) 7.18-7.24 (2H, m), 7.60 (1H, t, J=8.2Hz), 7.77 (1H, ddd,

$J=1.3, 6.9, 8.2\text{Hz}$), 7.88 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.16 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.36 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$), 9.09 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$).

MS m/z : $304(M^+)$, 303, 289, 248, 156.

実施例 3

5 3- (5-アセチル-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン (化合物番号 1-114 番) (B 工程)

3- (5-ブロモ-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン (806 mg、2.2 mmol) のトルエン (0.9 mL) 溶液に、トリブチル (1-エトキシビニル) スズ (0.85 mL、2.4 mmol)、
10 及びジクロロビストリフェニルフォスフィンパラジウム (15.8 mg、0.022 mmol) を加え、 100°C で 3 時間攪拌した後、希塩酸を加えいったん酸性にし、アンモニア水でアルカリ性にし、濾過し、濾液を濃縮して得られた残渣をクロマトグラフィーに付し、目的物 647 mg (収率 89%) を得た。

物性：油状物。

15 $^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm : 1.31 (6H, s), 2.67 (3H, s), 3.13 (2H, s), 7.32 (1H, t, $J=7.6\text{Hz}$), 7.37 (1H, dd, $J=1.4, 7.6\text{Hz}$), 7.60 (1H, ddd, $J=1.4, 6.9, 8.2\text{Hz}$), 7.78 (1H, ddd, $J=1.4, 6.9, 8.2\text{Hz}$), 7.82 (1H, dd, $J=1.4, 7.6\text{Hz}$), 7.87 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.16 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.35 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$), 9.06 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$).

20 MS m/z : $328(M^+)$, 313, 285.

実施例 4

3- (3, 3-ジメチル-1, 2, 3, 4-テトラヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン (化合物番号 2-1 番) (C 工程)

25 3- (3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン (650 mg、2.7 mmol) のエタノール (30 mL) 溶液に、水素化ホウ素ナトリウム (370 mg、1.0 mmol) を加え、3 時間加熱還流した後、この反応溶液を氷水中に注ぎ、酢酸エチルで抽出して得られた残渣をクロマトグラフィーに付し、目的物 420 mg (収率 54%) を得た。

融点： $117\sim 122^\circ\text{C}$ 。

$^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm : 1.24 (3H, s), 1.29 (3H, s), 2.65 (1H, d, $J=15.8\text{Hz}$), 2.98 (1H, d, $J=15.8\text{Hz}$), 5.33 (1H, s), 6.70 (1H, d, $J=7.7\text{Hz}$), 6.99-7.03 (1H, m), 7.12 (2H, s), 7.49 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 7.65 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 7.74 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.08 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$), 8.09 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.85 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$).

MS m/z : 288(M^+), 273, 230, 202, 160, 144, 128, 155.

実施例 5

3-(2, 3, 3-トリメチルー1, 2, 3, 4-テトラヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン (化合物番号2-33番) (D工程)

3-(3, 3-ジメチルー1, 2, 3, 4-テトラヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン (144mg, 0.5ミリモル) のアセトン (2mL) 溶液に、炭酸カリウム (500mg, 3.6ミリモル) およびヨウ化メチル (0.33mL, 5.0ミリモル) を加え、室温で3時間攪拌した後、濾過し、濾液を濃縮して得られた残渣をクロマトグラフィーに付し、目的物60mg (収率40%) を得た。

融点: 116~118°C.

$^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm : 1.00 (3H, s), 1.35 (3H, s), 2.15 (3H, s), 2.61 (1H, d, $J=15.6\text{Hz}$), 3.23 (1H, d, $J=15.6\text{Hz}$), 4.58 (1H, s), 6.64 (1H, d, $J=7.9\text{Hz}$), 6.93 (1H, t, $J=7.9\text{Hz}$), 7.06-7.08 (2H, m), 7.51 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 7.65 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 7.78 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.07 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$), 8.08 (1H, d, $J=7.9\text{Hz}$), 8.84 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$).

MS m/z : 302(M^+), 287, 265, 230, 174, 158, 149, 128, 115.

実施例1~5と同様にして、以下の化合物を合成した。

実施例 6

3-(3, 3-ジメチルー3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン (化合物番号1-1番)

物性: 油状物。

$^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm : 1.33 (6H, s), 2.86 (2H, s), 7.20-7.27 (3H, m), 7.37-7.40 (1H, m), 7.56 (1H, t, $J=8.4\text{Hz}$), 7.74 (1H, t, $J=8.4\text{Hz}$),

7.86 (1H, d, $J=8.4\text{Hz}$), 8.16 (1H, d, $J=8.4\text{Hz}$), 8.39 (1H, d, $J=2.0\text{Hz}$),
9.11 (1H, d, $J=2.0\text{Hz}$).

MS m/z : 286 (M^+), 285, 271, 230, 128, 115.

実施例 7

- 5 3- (3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) -8-
フルオロキノリン (化合物番号1-7番)

物性 : 油状物。

- 10 $^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm : 1.34 (6H, s), 2.87 (2H, s), 7.16-7.29 (3H,
m), 7.42-7.54 (3H, m), 7.68 (1H, d, $J=7.6\text{Hz}$), 8.42 (1H, s), 9.14 (1H, d,
 $J=1.4\text{Hz}$).

MS m/z : 304 (M^+), 303, 289, 248, 144, 115.

実施例 8

- 15 3- (3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) -6-
クロロキノリン (化合物番号1-11番)

物性 : 油状物。

- 15 $^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm : 1.33 (6H, s), 2.87 (2H, s), 7.17 (1H, d,
 $J=7.7\text{Hz}$), 7.25 (1H, t, $J=7.7\text{Hz}$), 7.28 (1H, d, $J=7.7\text{Hz}$), 7.43 (1H, t,
 $J=7.7\text{Hz}$), 7.69 (1H, dd, $J=1.9, 8.8\text{Hz}$), 7.85 (1H, d, $J=1.9\text{Hz}$), 8.10 (1H,
d, $J=8.8\text{Hz}$), 8.28 (1H, d, $J=1.7\text{Hz}$), 9.10 (1H, d, $J=1.7\text{Hz}$).

- 20 MS m/z : 320 (M^+), 319, 305, 264, 229, 152, 116.

実施例 9

- 25 3- (3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) -8-
メチルキノリン (化合物番号1-19番)

物性 : 油状物。

- 25 $^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm : 1.33 (6H, s), 2.85 (3H, s), 2.87 (2H, s),
7.21-7.28 (3H, m), 7.40-7.43 (1H, m), 7.47 (1H, t, $J=7.6\text{Hz}$), 7.60 (1H, d,
 $J=7.6\text{Hz}$), 7.72 (1H, d, $J=7.6\text{Hz}$), 8.36 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$), 9.11 (1H, d,
 $J=2.1\text{Hz}$).

MS m/z : 300 (M^+), 299, 285, 244, 149, 115.

実施例 10

3- (3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) -8-
メトキシキノリン (化合物番号 1-25 番)

物性: 油状物。

5 ¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.33 (6H, s), 2.87 (2H, s), 4.12 (3H, s),
7.10 (1H, d, J=7.6Hz), 7.17 (1H, d, J=7.6Hz), 7.21 (1H, t, J=7.6Hz),
7.27 (1H, d, J=7.6Hz), 7.41 (1H, t, J=7.6Hz), 7.46 (1H, t, J=7.6Hz),
7.51 (1H, d, J=7.6Hz), 8.39 (1H, d, J=1.4Hz), 9.06 (1H, d, J=1.4Hz).
MS m/z : 316(M⁺), 315, 301, 286, 260, 230, 149, 128, 115.

10 実施例 11

3- (3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) -8-
ヒドロキシキノリン (化合物番号 1-31 番)

物性: 油状物。

15 ¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.32 (6H, s), 2.86 (2H, s), 5.33 (1H, s),
7.18-7.47 (7H, m), 8.35 (1H, s), 8.98 (1H, s).
MS m/z : 303, 302(M⁺), 288, 245, 164, 149, 129, 115.

実施例 12

3- (5-フルオロ-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-
1-イル) -4-クロロキノリン (化合物番号 1-35 番)

20 物性: 油状物。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.35 (3H, s), 1.47 (3H, s), 2.91 (1H, d,
J=15.8Hz), 2.98 (1H, d, J=15.8Hz), 6.71 (1H, dd, J=1.4, 7.6Hz), 7.11-
7.17 (2H, m), 7.70 (1H, ddd, J=1.4, 6.9, 8.2Hz), 7.82 (1H, ddd, J=1.4,
6.9, 8.2Hz), 8.18 (1H, d, J=8.2Hz), 8.30 (1H, d, J=8.2Hz), 8.81 (1H, s).
25 MS m/z : 338(M⁺), 323, 303, 287, 247.

実施例 13

3- (5-フルオロ-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-
1-イル) -4-メトキシキノリン (化合物番号 1-37 番)

物性: アモルファス。

$^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm : 1.40 (6H, brs), 2.42 (2H, brs), 3.90 (3H, s), 6.82-6.86 (1H, m), 7.15-7.17 (2H, m), 7.57 (1H, ddd, $J=1.4, 6.9, 8.2\text{Hz}$), 7.75 (1H, ddd, $J=1.4, 6.9, 8.2\text{Hz}$), 8.11 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.23 (1H, dd, $J=1.4, 8.2\text{Hz}$), 8.70 (1H, s).

5 MS m/z : 334(M^+), 319, 303, 288, 277, 263.

実施例 14

3-(5-フルオロ-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)-8-メチルキノリン (化合物番号 1-38 番)

物性 : 油状物。

10 $^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm : 1.35 (6H, s), 2.85 (3H, s), 2.89 (2Hs), 7.05 (1H, d, $J=6.9\text{Hz}$), 7.18-7.22 (2H, m), 7.47 (1H, t, $J=7.3\text{Hz}$), 7.61 (1H, d, $J=6.9\text{Hz}$), 7.73 (1H, d, $J=7.3\text{Hz}$), 8.34 (1H, s), 9.09 (1H, s).

MS m/z : 318(M^+), 317, 303, 262, 152, 134, 115.

実施例 15

15 3-(5-フルオロ-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)-8-メトキシキノリン (化合物番号 1-39 番)

物性 : 油状物。

20 $^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm : 1.36 (6H, s), 2.89 (2H, s), 4.12 (3H, s), 7.00 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 7.12 (1H, d, $J=7.6\text{Hz}$), 7.18-7.27 (2H, m), 7.46 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 7.51 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 8.37 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$), 9.04 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$).

MS m/z : 334(M^+), 333, 319, 278, 248, 167.

実施例 16

25 3-(6-フルオロ-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン (化合物番号 1-41 番)

物性 : 油状物。

$^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm : 1.33 (6H, s), 2.85 (2H, s), 6.91 (1H, td, $J=2.1, 8.9\text{Hz}$), 6.98 (1H, dd, $J=2.1, 8.9\text{Hz}$), 7.21 (1H, dd, $J=5.5, 8.2\text{Hz}$), 7.58 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 7.76 (1H, ddd, $J=1.4, 6.9, 8.2\text{Hz}$), 7.87 (1H, d,

$J=8.2\text{Hz}$), 8.16 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.36 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$), 9.09 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$).

MS m/z : 304(M^+), 303, 289, 279, 248, 156.

実施例 17

- 5 3- (7-フルオロ-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン (化合物番号 1-42 番)

物性 : 油状物。

- 10 $^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm : 1.33 (6H, s), 2.83 (2H, s), 6.93 (1H, dd, $J=2.7, 8.9\text{Hz}$), 7.13 (1H, td, $J=2.7, 8.2\text{Hz}$), 7.25 (1H, dd, $J=5.5, 8.2\text{Hz}$), 7.60 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 7.78 (1H, ddd, $J=1.4, 6.9, 8.2\text{Hz}$), 7.88 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.17 (1H, d, $J=8.9\text{Hz}$), 8.30 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$), 9.11 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$).

MS m/z : 304(M^+), 303, 289, 248, 156.

実施例 18

- 15 3- (5-クロロ-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン (化合物番号 1-44 番)

融点 : 85~88°C。

- 20 $^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm : 1.36 (6H, s), 2.97 (2H, s), 7.11-7.22 (2H, m), 7.49 (1H, dd, $J=1.3, 7.6\text{Hz}$), 7.58 (1H, ddd, $J=1.3, 6.9, 8.2\text{Hz}$), 7.76 (1H, ddd, $J=1.6, 6.9, 8.2\text{Hz}$), 7.87 (1H, d, $J=7.9\text{Hz}$), 8.16 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.34 (1H, d, $J=2.0\text{Hz}$), 9.06 (1H, d, $J=2.0\text{Hz}$).

MS m/z : 320(M^+), 319, 305, 285, 264.

実施例 19

- 25 3- (5-クロロ-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) -4-メチルキノリン (化合物番号 1-49 番)

物性 : 油状物。

$^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm : 1.41 (6H, s), 2.54 (3H, s), 3.03 (2H, s), 6.78 (1H, d, $J=7.6\text{Hz}$), 7.09 (1H, t, $J=7.6\text{Hz}$), 7.45 (1H, d, $J=7.6\text{Hz}$), 7.61 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 7.75 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 8.06 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$),

8.14 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.71 (1H, s).

MS m/z : 334(M^+), 333, 319, 194, 149, 115.

実施例 20

3-(6-クロロ-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-
イル) キノリン (化合物番号 1-53 番)

物性：油状物。

$^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm : 1.33 (6H, s), 2.84 (2H, s), 7.13-7.27 (3H, m), 7.59 (1H, t, $J=7.9\text{Hz}$), 7.77 (1H, ddd, $J=1.3, 6.9, 8.2\text{Hz}$), 7.87 (1H, d, $J=7.9\text{Hz}$), 8.16 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.34 (1H, d, $J=2.0\text{Hz}$), 9.08 (1H, d, $J=2.0\text{Hz}$).

MS m/z : 320(M^+), 319, 305, 285, 264.

実施例 21

3-(7-クロロ-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-
イル) キノリン (化合物番号 1-54 番)

物性：アモルファス。

$^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm : 1.33 (6H, s), 2.82 (2H, s), 7.16-7.26 (2H, m), 7.34 (1H, dd, $J=2.3, 8.2\text{Hz}$), 7.60 (1H, t, $J=7.9\text{Hz}$), 7.77 (1H, ddd, $J=1.3, 6.9, 8.2\text{Hz}$), 7.88 (1H, d, $J=7.9\text{Hz}$), 8.17 (1H, d, $J=8.6\text{Hz}$), 8.36 (1H, d, $J=2.0\text{Hz}$), 9.09 (1H, d, $J=2.0\text{Hz}$).

MS m/z : 320(M^+), 319, 305, 285, 264.

実施例 22

3-(5-ブロモ-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-
イル) キノリン (化合物番号 1-56 番)

物性：アモルファス。

$^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm : 1.33 (6H, s), 2.84 (2H, s), 7.09 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 7.39 (1H, dd, $J=1.6, 8.2\text{Hz}$), 7.44 (1H, d, $J=1.6\text{Hz}$), 7.59 (1H, ddd, $J=1.1, 6.6, 8.2\text{Hz}$), 7.77 (1H, ddd, $J=1.1, 6.6, 8.2\text{Hz}$), 7.87 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.16 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.35 (1H, d, $J=2.2\text{Hz}$), 9.08 (1H, d, $J=2.2\text{Hz}$).

MS m/z : 365(M⁺), 349, 309, 285, 269.

実施例 2 3

3- (6-ブロモ-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン (化合物番号 1-6 5 番)

5 物性 : 油状物。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.33 (6H, s), 2.84 (2H, s), 7.09 (1H, d, J=8.2Hz), 7.39 (1H, dd, J=1.6, 8.2Hz), 7.44 (1H, d, J=1.6Hz), 7.59 (1H, ddd, J=1.1, 6.6, 8.2Hz), 7.77 (1H, ddd, J=1.1, 6.6, 8.2Hz), 7.87 (1H, d, J=8.2Hz), 8.16 (1H, d, J=8.2Hz), 8.35 (1H, d, J=2.2Hz), 9.08 (1H, d, J=2.2Hz).

10 MS m/z : 365(M⁺), 349, 309, 285, 269.

実施例 2 4

3- (7-ブロモ-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン (化合物番号 1-6 6 番)

15 物性 : アモルファス。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.33 (6H, s), 2.81 (2H, s), 7.17 (1H, d, J=7.7Hz), 7.34 (1H, d, J=1.6Hz), 7.55 (1H, dd, J=1.6, 7.7Hz), 7.61 (1H, ddd, J=1.1, 7.1, 8.2Hz), 7.78 (1H, ddd, J=1.6, 7.1, 8.2Hz), 7.90 (1H, d, J=8.2Hz), 8.18 (1H, d, J=8.2Hz), 8.36 (1H, d, J=2.2Hz), 9.09 (1H, d, J=2.2Hz).

20 MS m/z : 365(M⁺), 349, 309, 285, 229.

実施例 2 5

3- (5-ヨード-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン (化合物番号 1-6 8 番)

25 物性 : 油状物。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.35 (6H, s), 2.92 (2H, s), 6.99 (1H, t, J=8.2Hz), 7.19 (1H, d, J=8.2Hz), 7.59 (1H, t, J=8.2Hz), 7.77 (1H, ddd, J=1.4, 6.9, 8.2Hz), 7.87 (1H, d, J=8.2Hz), 7.92 (1H, d, J=8.2Hz), 8.16 (1H, d, J=8.2Hz), 8.34 (1H, d, J=2.1Hz), 9.06 (1H, d, J=2.1Hz).

MS m/z : 412(M⁺), 397, 355, 285, 243, 229.

実施例 2 6

3- (3, 3, 5-トリメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)
キノリン (化合物番号 1-69 番)

5 物性 : 油状物。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.34 (6H, s), 2.37 (3H, s), 2.81 (2H, s),
7.04 (1H, d, J=7.6Hz) 7.13 (1H, t, J=7.6Hz), 7.30 (1H, d, J=7.6Hz), 7.58
(1H, ddd, J=1.4, 6.9, 7.6Hz), 7.75 (1H, ddd, J=1.4, 6.9, 8.2Hz), 7.86
(1H, d, J=7.6Hz), 8.15 (1H, d, J=7.6Hz), 8.35 (1H, d, J=2.1Hz), 9.07 (1H,
10 d, J=2.1Hz).

MS m/z : 300(M⁺), 299, 285, 269, 258, 244.

実施例 2 7

3- (3, 3, 6-トリメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)
キノリン (化合物番号 1-70 番)

15 物性 : 油状物。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.33 (6H, s), 2.39 (3H, s), 2.82 (2H, s),
7.04-7.09 (3H, d, m), 7.57 (1H, t, J=8.2Hz), 7.75 (1H, ddd, J=1.4, 6.9,
8.2Hz), 7.86 (1H, d, J=8.2Hz), 8.16 (1H, d, J=8.2Hz), 8.36 (1H, d,
J=2.1Hz), 9.10 (1H, d, J=2.1Hz).

20 MS m/z : 300(M⁺), 299, 285, 269, 258, 244.

実施例 2 8

3- (3, 3, 7-トリメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)
キノリン (化合物番号 1-71 番)

物性 : 油状物。

25 ¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.32 (6H, s), 2.26 (3H, s), 2.82 (2H, s),
6.99 (1H, s), 7.14-7.24 (2H, m), 7.58 (1H, ddd, J=1.3, 6.9, 8.2Hz), 7.76
(1H, ddd, J=1.3, 6.9, 8.2Hz), 7.89 (1H, d, J=8.2Hz), 8.16 (1H, d,
J=8.2Hz), 8.38 (1H, d, J=2.0Hz), 9.09 (1H, d, J=2.0Hz).

MS m/z : 300(M⁺), 299, 285, 269, 258, 244, 156.

実施例 29

3-(5-ビニル-3,3-ジメチル-4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン (化合物番号 1-81 番)

物性：油状物。

5 $^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm : 1.34 (6H, s), 2.91 (2H, s), 5.45 (1H, d, $J=11.0\text{Hz}$), 5.72 (1H, t, $J=17.2\text{Hz}$), 7.02 (1H, dd, $J=11.0, 17.2\text{Hz}$), 7.13 (1H, d, $J=7.6\text{Hz}$), 7.23 (1H, t, $J=7.6\text{Hz}$), 7.58 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 7.62 (1H, d, $J=7.6\text{Hz}$), 7.76 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 7.87 (1H, d, $J=7.6\text{Hz}$), 8.16 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.36 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$), 9.08 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$).

10 MS m/z : 312(M^+), 311 297, 285, 269, 256.

実施例 30

3-(5-エチニル-3,3-ジメチル-4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン (化合物番号 1-85 番)

物性：アモルファス。

15 $^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm : 1.35 (6H, s), 3.06 (2H, s), 3.36 (1H, s), 7.21 (2H, d, $J=4.4\text{Hz}$), 7.58-7.62 (2H, m), 7.77 (1H, ddd, $J=1.6, 7.1, 7.7\text{Hz}$), 7.88 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.16 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.35 (1H, d, $J=2.2\text{Hz}$), 9.07 (1H, d, $J=2.2\text{Hz}$).

MS m/z : 310(M^+), 295, 268, 254.

20 実施例 31

3-(5-フェニル-3,3-ジメチル-4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン (化合物番号 1-89 番)

物性：油状物。

25 $^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm : 1.25 (6H, s), 2.81 (2H, s), 7.21-7.32 (2H, m), 7.36-7.51 (6H, m), 7.58 (1H, ddd, $J=1.4, 6.9, 7.9\text{Hz}$), 7.58 (1H, ddd, $J=1.4, 6.9, 8.5\text{Hz}$), 7.89 (1H, d, $J=7.9\text{Hz}$), 8.17 (1H, d, $J=8.5\text{Hz}$), 8.42 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$), 9.15 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$).

MS m/z : 362(M^+), 347 306.

実施例 32

3-[5-(2-チエニル)-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル]キノリン (化合物番号1-94番)

物性：アモルファス。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.29 (6H, s), 2.96 (2H, s), 7.10 (1H, dd, J=1.1, 3.8Hz), 7.17 (1H, dd, J=3.8, 4.9Hz), 7.22 (1H, dd, J=1.1, 7.7Hz), 7.26-7.29 (1H, m), 7.43 (1H, dd, J=1.1, 4.9Hz), 7.57-7.61 (2H, m), 7.77 (1H, ddd, J=1.6, 7.1, 8.2Hz), 7.89 (1H, d, J=7.6Hz), 8.17 (1H, d, J=8.2Hz), 8.40 (1H, d, J=2.2Hz), 9.13 (1H, d, J=2.2Hz).

MS m/z : 368(M⁺), 353, 326, 312, 299, 285, 271.

実施例 3 3

3-[5-(3-チエニル)-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル]キノリン (化合物番号1-95番)

物性：アモルファス。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.28 (6H, s), 2.88 (2H, s), 7.19-7.21 (2H, m), 7.26-7.27 (1H, m), 7.30 (1H, dd, J=1.1, 2.7Hz), 7.46 (1H, dd, J=2.7, 4.9Hz), 7.50 (1H, dd, J=1.1, 7.7Hz), 7.60 (1H, ddd, J=1.1, 7.1, 8.2Hz), 7.77 (1H, ddd, J=1.1, 7.1, 8.2Hz), 7.86 (1H, d, J=8.2Hz), 8.17 (1H, d, J=8.2Hz), 8.41 (1H, d, J=2.2Hz), 9.13 (1H, d, J=2.2Hz).

MS m/z : 368(M⁺), 353, 326, 312, 285, 271.

実施例 3 4

3-[5-(5-オキサゾリル)-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル]キノリン (化合物番号1-97番)

融点：175~179°C。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.33 (6H, s), 3.00 (2H, s), 7.26-7.31 (2H, m), 7.35 (1H, t, J=7.7Hz), 7.60 (1H, ddd, J=1.1, 7.1, 8.2Hz), 7.76-7.80 (2H, m), 7.88 (1H, d, J=8.2Hz), 8.05 (1H, s), 8.17 (1H, d, J=8.2Hz), 8.38 (1H, d, J=2.2Hz), 9.10 (1H, d, J=2.2Hz).

MS m/z : 353(M⁺), 338, 311, 297, 269.

実施例 3 5

1 - (3, 3-ジメチル-1-キノリン-3-イル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-5-イル) エタノン=オキシム (化合物番号 1-98 番)

融点: 187~190°C。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.31 (6H, s), 2.29 (3H, s), 2.89 (2H, s),
5 7.21 (1H, dd, J=1.4, 7.6Hz), 7.25 (1H, t, J=7.6Hz), 7.41 (1H, dd, J=1.4,
7.6Hz), 7.59 (1H, ddd, J=1.4, 6.9, 8.2Hz), 7.77 (1H, ddd, J=1.4, 6.9,
8.2Hz), 7.87 (1H, d, J=8.2Hz), 8.19 (1H, d, J=8.2Hz), 8.39 (1H, d,
J=2.1Hz), 9.11 (1H, d, J=2.1Hz), 9.39 (1H, brs).

MS m/z : 343(M⁺), 326, 310, 296, 285, 269.

10 実施例 36

1 - (3, 3-ジメチル-1-キノリン-3-イル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-5-イル) エタノン=O-メチルオキシム (化合物番号 1-100 番)

実施例 37 の化合物の立体異性体

物性: 油状物。

15 ¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.31 (6H, s), 2.24 (3H, s), 2.89 (2H, s),
4.03 (3H, s), 7.21 (1H, dd, J=1.4, 7.6Hz), 7.25-7.28 (1H, m), 7.42 (1H,
dd, J=1.4, 7.6Hz), 7.59 (1H, t, J=8.2Hz), 7.76 (1H, ddd, J=1.4, 6.9,
8.2Hz), 7.87 (1H, d, J=8.2Hz), 8.16 (1H, d, J=8.2Hz), 8.36 (1H, d,
J=2.1Hz), 9.08 (1H, d, J=2.1Hz).

20 MS m/z : 357(M⁺), 342, 326, 310, 285, 269.

実施例 37

1 - (3, 3-ジメチル-1-キノリン-3-イル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-5-イル) エタノン=O-メチルオキシム (化合物番号 1-100 番)

実施例 36 の化合物の立体異性体

25 物性: 油状物。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.32 (6H, s), 2.20 (3H, s), 2.69 (2H, brs),
3.85 (3H, s), 7.21 (1H, d, J=7.6Hz), 7.22 (1H, d, J=7.6Hz), 7.29 (1H, t,
J=7.6Hz), 7.59 (1H, t, J=8.2Hz), 7.77 (1H, ddd, J=1.4, 6.9, 8.2Hz), 7.87
(1H, d, J=8.2Hz), 8.16 (1H, d, J=8.2Hz), 8.39 (1H, d, J=2.1Hz), 9.12 (1H,

d, $J=2.1\text{Hz}$).

MS m/z : 357 (M^+), 342, 326, 310, 285, 269.

実施例 38

1 - (3, 3-ジメチル-1-キノリン-3-イル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-5-イル) エタノン=O-エチルオキシム (化合物番号 1-101 番)

実施例 39 の化合物の立体異性体

物性: アモルファス。

$^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm : 1.31 (6H, s), 1.37 (3H, t, $J=6.9\text{Hz}$), 2.26 (3H, s), 2.90 (2H, s), 4.27 (2H, q, $J=6.9\text{Hz}$), 7.20 (1H, dd, $J=1.4, 7.6\text{Hz}$), 7.26 (1H, t, $J=7.6\text{Hz}$), 7.43 (1H, dd, $J=1.4, 7.6\text{Hz}$), 7.59 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 7.76 (1H, ddd, $J=1.4, 6.9, 8.2\text{Hz}$), 7.87 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.16 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.36 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$), 9.08 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$).

MS m/z : 371 (M^+), 356, 326, 310, 285, 269.

実施例 39

1 - (3, 3-ジメチル-1-キノリン-3-イル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-5-イル) エタノン=O-エチルオキシム (化合物番号 1-101 番)

実施例 38 の化合物の立体異性体

物性: アモルファス。

$^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm : 1.23 (3H, t, $J=6.9\text{Hz}$), 1.32 (6H, s), 2.19 (3H, s), 2.69 (2H, brs), 4.10 (2H, q, $J=6.9\text{Hz}$), 7.19-7.23 (2H, m), 7.59 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 7.77 (1H, ddd, $J=1.4, 6.9, 8.2\text{Hz}$), 7.88 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.17 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.39 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$), 9.12 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$).

MS m/z : 371 (M^+), 356, 326, 310, 285, 269.

実施例 40

1 - (3, 3-ジメチル-1-キノリン-3-イル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-5-イル) エタノン=O-*tert*-ブチルオキシム (化合物番号 1-103 番)

物性: アモルファス。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.30 (6H, s), 1.37 (9H, s), 2.24 (3H, s), 2.95 (2H, s), 7.18 (1H, d, J=7.6Hz), 7.26 (1H, t, J=7.6Hz) 7.44 (1H, dd, J=1.4, 7.6Hz), 7.59 (1H, ddd, J=1.4, 6.9, 8.2Hz), 7.76 (1H, ddd, J=1.4, 6.9, 8.2Hz), 7.87 (1H, d, J=8.2Hz), 8.16 (1H, d, J=8.2Hz), 8.37 (1H, d, J=2.1Hz), 9.10 (1H, d, J=2.1Hz).

MS m/z : 399(M⁺), 384, 342, 326, 310, 285, 269.

実施例 4 1

1 - (3, 3-ジメチルー1-キノリン-3-イル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-5-イル) エタノン=O-アリルオキシム (化合物番号1-104番)

実施例 4 2 の化合物の立体異性体

物性 : 油状物。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.31 (6H, s), 2.20 (3H, s), 2.70 (2H, brs), 4.55 (2H, d, J=6.2Hz), 5.19 (1H, ddd, J=1.4, 2.7, 11.7Hz), 5.23 (1H, ddd, J=1.4, 2.7, 17.2Hz), 5.94-5.99 (1H, m), 7.21-7.23 (2H, m), 7.28 (1H, t, J=7.6Hz), 7.59 (1H, ddd, J=1.4, 6.9, 8.2Hz), 7.77 (1H, ddd, J=1.4, 6.9, 8.2Hz), 7.88 (1H, d, J=8.2Hz), 8.16 (1H, d, J=8.2Hz), 8.36 (1H, d, J=2.1Hz), 9.11 (1H, d, J=2.1Hz).

実施例 4 2

1 - (3, 3-ジメチルー1-キノリン-3-イル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-5-イル) エタノン=O-アリルオキシム (化合物番号1-104番)

実施例 4 1 の化合物の立体異性体

物性 : 128~131°C。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.31 (6H, s), 2.28 (3H, s), 2.90 (2H, s), 4.73 (2H, d, J=5.5Hz), 5.28 (1H, ddd, J=1.4, 2.7, 10.3Hz), 5.38 (1H, ddd, J=1.4, 2.7, 17.2Hz), 6.05-6.13 (1H, m), 7.21 (1H, d, J=7.6Hz), 7.24-7.28 (1H, m), 7.42 (1H, dd, J=1.4, 7.6Hz), 7.59 (1H, t, J=8.2Hz), 7.78 (1H, ddd, J=1.4, 6.9, 8.2Hz), 7.87 (1H, d, J=8.2Hz), 8.16 (1H, d, J=8.2Hz), 8.36 (1H, d, J=2.1Hz), 9.08 (1H, d, J=2.1Hz).

MS m/z : 383(M⁺), 368, 326, 310, 285, 269.

実施例 4 3

1- (3, 3-ジメチル-1-キノリン-3-イル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-5-イル) エタノン=O-ベンジルオキシム (化合物番号 1-105 番)

5 物性：油状物。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.21 (6H, s), 2.29 (3H, s), 2.72 (2H, s), 5.25 (2H, s), 7.18-7.45 (8H, m), 7.58 (1H, t, J=7.6Hz), 7.76 (1H, ddd, J=1.4, 6.9, 8.2Hz), 7.86 (1H, d, J=7.6Hz), 8.15 (1H, d, J=8.2Hz), 8.39 (1H, d, J=2.1Hz), 9.06 (1H, d, J=2.1Hz).

10 MS m/z : 433(M⁺), 418, 326, 310, 285, 269.

実施例 4 4

1- (3, 3-ジメチル-1-キノリン-3-イル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-5-イル) エタノン=O-フェニルオキシム (化合物番号 1-106 番) 立体異性体混合物 (1対2)

15 物性：アモルファス。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.28 (12H x 1/3, s), 1.33 (12H x 2/3, s), 2.35 (6H x 1/3, s), 2.48 (6H x 2/3, s), 2.74 (4H x 1/3, brs), 2.99 (4H x 2/3, s), 7.00-7.53 (16H, m), 7.58-7.62 (2H, m), 7.76-7.79 (2H, m), 7.88-7.89 (2H, m), 8.16-8.18 (2H, m), 8.39 (2H x 2/3, d, J=2.1Hz), 8.41 (2H x 1/3, d, J=2.1Hz), 9.11 (2H x 2/3, d, J=2.1Hz), 9.13 (2H x 1/3, d, J=2.1Hz).

20 MS m/z : 419(M⁺), 404, 326, 310, 269, 255.

実施例 4 5

3- (6-メトキシ-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン (化合物番号 1-108 番)

25 物性：油状物。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.33 (6H, s), 2.83 (2H, s), 3.86 (3H, s), 6.71 (1H, dd, J=2.8, 8.2Hz), 6.80 (1H, d, J=2.8Hz), 7.14 (1H, d, J=8.2Hz), 7.58 (1H, t, J=8.2Hz), 7.75 (1H, ddd, J=1.4, 6.9, 8.2Hz), 7.87 (1H, d, J=7.6Hz), 8.15 (1H, d, J=8.2Hz), 8.36 (1H, d, J=2.1Hz), 9.09 (1H, d,

$J=2.1\text{Hz}$).

MS m/z : 316(M^+), 315, 301, 285, 260.

実施例 4 6

3 - (8 - メトキシ - 3, 3 - ジメチル - 3, 4 - ジヒドロイソキノリン - 1 - イル) キノリン (化合物番号 1 - 1 1 0 番)

物性 : 油状物。

$^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm : 1.30 (6H, s), 2.79 (2H, s), 3.40 (3H, s), 6.82 (1H, d, $J=8.9\text{Hz}$) 6.89 (1H, d, $J=7.6\text{Hz}$), 7.39 (1H, t, $J=7.6\text{Hz}$), 7.53 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 7.69 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 7.80 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.10 (1H, d, $J=8.9\text{Hz}$), 8.83 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$), 8.85 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$).

MS m/z : 316(M^+), 315, 301, 285, 260.

実施例 4 7

3 - (5 - アミノ - 3, 3 - ジメチル - 3, 4 - ジヒドロイソキノリン - 1 - イル) キノリン (化合物番号 1 - 1 1 1 番)

融点 : 181~184°C.

$^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm : 1.37 (6H, s), 2.63 (2H, s), 3.76 (2H, brs), 6.65 (1H, dd, $J=1.1, 7.7\text{Hz}$), 6.84 (1H, dd, $J=1.1, 7.7\text{Hz}$), 7.05 (1H, t, $J=7.7\text{Hz}$), 7.57 (1H, ddd, $J=1.3, 6.9, 8.2\text{Hz}$), 7.74 (1H, ddd, $J=1.3, 6.9, 8.5\text{Hz}$), 7.86 (1H, dd, $J=1.3, 8.2\text{Hz}$), 8.15 (1H, d, $J=8.5\text{Hz}$), 8.34 (1H, d, $J=2.3\text{Hz}$), 9.07 (1H, d, $J=2.3\text{Hz}$).

MS m/z : 401(M^+), 286, 270, 259, 245.

実施例 4 8

3 - (5 - アセチルアミノ - 3, 3 - ジメチル - 3, 4 - ジヒドロイソキノリン - 1 - イル) キノリン (化合物番号 1 - 1 1 2 番)

物性 : アモルファス。

$^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm : 1.32 (6H, s), 2.27 (3H, s), 2.72 (2H, s), 7.08 (1H, d, $J=7.7\text{Hz}$), 7.20-7.26 (1H, m), 7.43 (1H, brs), 7.58 (1H, ddd, $J=1.1, 6.9, 7.9\text{Hz}$), 7.71-7.79 (2H, m), 7.86 (1H, d, $J=7.9\text{Hz}$), 8.15 (1H, d, $J=8.5\text{Hz}$), 8.35 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$), 9.08 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$).

MS m/z : 343(M⁺), 328, 300, 285, 269, 245.

実施例 4 9

3 - (5 - ホルミル - 3, 3 - ジメチル - 3, 4 - ジヒドロイソキノリン - 1 - イル) キノリン

物性 : 油状物。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.36 (6H, s), 3.37 (2H, s), 7.43 (1H, t, J=7.7Hz), 7.49 (1H, dd, J=1.1, 7.7Hz), 7.60 (1H, ddd, J=1.1, 7.1, 8.2Hz), 7.78 (1H, ddd, J=1.1, 7.1, 8.2Hz), 7.88 (1H, d, J=8.2Hz), 7.97 (1H, dd, J=1.1, 7.7Hz), 8.17 (1H, d, J=8.2Hz), 8.35 (1H, d, J=2.2Hz), 9.07 (1H, d, J=2.2Hz), 10.4 (1H, s).

MS m/z : 314(M⁺), 299, 285, 269, 258, 244.

実施例 5 0

3 - (5 - メチルアミノカルボニル - 3, 3 - ジメチル - 3, 4 - ジヒドロイソキノリン - 1 - イル) キノリン (化合物番号 1 - 1 1 5 番)

物性 : アモルファス。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.31 (3H, brs), 1.43 (3H, s), 2.19 (3H, s), 2.75 (2H, brs), 7.22 (1H, dd, J=1.6, 7.7Hz), 7.25 (1H, dd, J=1.6, 7.7Hz), 7.30 (1H, t, J=7.7Hz), 7.59 (1H, ddd, J=1.1, 6.6, 7.7Hz), 7.77 (1H, ddd, J=1.1, 6.6, 8.2Hz), 7.87 (1H, d, J=7.7Hz), 8.19 (1H, d, J=8.2Hz), 8.41 (1H, d, J=2.2Hz), 8.94 (1H, brs), 9.12 (1H, d, J=2.2Hz).

MS m/z : 343(M⁺), 326, 310, 285, 269.

実施例 5 1

3 - (5 - シアノ - 3, 3 - ジメチル - 3, 4 - ジヒドロイソキノリン - 1 - イル) キノリン (化合物番号 1 - 1 1 6 番)

物性 : アモルファス。

¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.37 (6H, s), 3.10 (2H, s), 7.37 (1H, t, J=7.9Hz), 7.48 (1H, dd, J=0.8, 7.9Hz), 7.61 (1H, ddd, J=1.2, 6.9, 8.2Hz), 7.73-7.82 (2H, m), 7.88 (1H, d, J=7.9Hz), 8.17 (1H, d, J=8.5Hz), 8.35 (1H, d, J=2.1Hz), 9.06 (1H, d, J=2.1Hz).

MS m/z : 311(M⁺), 310, 296, 269, 255

実施例 5 2

3 - (5, 6 - ジフルオロー 3, 3 - ジメチルー 3, 4 - ジヒドロイソキノリン - 1 - イル) キノリン (化合物番号 1 - 1 1 7 番)

5 物性 : ガム状。

¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.36 (6H, s), 2.91 (2H, s), 7.01-7.08 (2H, m), 7.57-7.62 (1H, m) 7.74-7.80 (1H, m), 7.87 (1H, d, J=8.2Hz), 8.16 (1H, d, J=8.5Hz), 8.33 (1H, d, J=2.1Hz), 9.06 (1H, d, J=2.1Hz).

MS m/z : 322(M⁺), 321, 307, 266.

10 実施例 5 3

3 - (5, 6 - ジクロロー 3, 3 - ジメチルー 3, 4 - ジヒドロイソキノリン - 1 - イル) キノリン (化合物番号 1 - 1 2 6 番)

物性 : 油状物。

15 ¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.36 (6H, s), 3.02 (2H, s), 7.10 (1H, d, J=8.2Hz) 7.37 (1H, d, J=8.2Hz), 7.60 (1H, t, J=8.2Hz), 7.78 (1H, ddd, J=1.4, 6.9, 8.2Hz), 7.87 (1H, d, J=8.2Hz), 8.16 (1H, d, J=8.2Hz), 8.33 (1H, d, J=2.1Hz), 9.05 (1H, d, J=2.1Hz).

MS m/z : 355(M⁺), 354, 353, 319, 298, 263.

実施例 5 4

20 3 - (6 - フルオロー 3, 3, 7 - トリメチルー 3, 4 - ジヒドロイソキノリン - 1 - イル) キノリン (化合物番号 1 - 1 3 6 番)

物性 : 油状物。

25 ¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.32 (6H, s), 2.18 (3H, s), 2.81 (2H, s), 6.93 (1H, d, J=9.5Hz), 7.02 (1H, d, J=7.4Hz), 7.59 (1H, ddd, J=1.1, 6.9, 8.2Hz), 7.77 (1H, ddd, J=1.4, 6.9, 8.2Hz), 7.89 (1H, dd, J=1.1, 8.2Hz), 8.16 (1H, d, J=8.2Hz), 8.36 (1H, d, J=2.1Hz), 9.06 (1H, d, J=2.1Hz).

MS m/z : 318(M⁺), 317, 303, 262.

実施例 5 5

3 - (3 - エチルー 3 - メチルー 3, 4 - ジヒドロイソキノリン - 1 - イル)

キノリン (化合物番号 1-137 番)

物性: ガム状。

¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.01 (3H, t, J=7.4Hz), 1.25 (3H, s), 1.63 (1H, qd, J=13.0Hz, 7.4Hz), 1.73 (1H, qd, J=13.0Hz, 7.4Hz), 2.78 (1H, d, J=15.8Hz), 2.90 (1H, d, J=15.8Hz), 7.19-7.28 (3H, m), 7.38-7.43 (1H, m), 7.58 (1H, dd, J=7.9Hz, 7.1Hz), 7.76 (1H, dd, J=8.5Hz, 7.1Hz), 7.87 (1H, d, J=7.9Hz), 8.16 (1H, d, J=8.5Hz), 8.37 (1H, d, J=2.1Hz), 9.12 (1H, d, J=2.1Hz).

MS m/z : 300(M⁺), 285, 271, 255, 245, 230, 202, 128.

実施例 56

3-(3-エチル-5-フルオロ-3-メチル-3,4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン (化合物番号 1-147 番)

物性: ガム状。

¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.03 (3H, t, J=7.4Hz), 1.26 (3H, s), 1.65 (1H, qd, J=14.0Hz, 7.4Hz), 1.74 (1H, qd, J=14.0Hz, 7.4Hz), 2.82 (1H, d, J=16.4Hz), 2.88 (1H, d, J=16.4Hz), 7.04 (1H, dd, J=6.6Hz, 2.1Hz), 7.14-7.23 (2H, m), 7.61 (1H, ddd, J=8.2Hz, 6.9Hz, 1.3Hz), 7.77 (1H, ddd, J=8.2Hz, 6.9Hz, 1.3Hz), 7.87 (1H, d, J=8.2Hz), 8.15 (1H, d, J=8.2Hz), 8.35 (1H, d, J=2.1Hz), 9.10 (1H, d, J=2.1Hz).

MS m/z : 318(M⁺), 303, 289, 263, 248, 220, 134.

実施例 57

3-(3-メチル-3-プロピル-3,4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン (化合物番号 1-175 番)

物性: ガム状。

¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm 0.92 (3H, t, J=7.5Hz), 1.26 (3H, s), 1.43-1.70 (4H, m), 2.78 (1H, d, J=15.8Hz), 2.92 (1H, d, J=15.8Hz), 7.19-7.27 (3H, m), 7.37-7.44 (1H, m), 7.58 (1H, ddd, J=8.2Hz, 7.1Hz, 1.3Hz), 7.76 (1H, ddd, J=8.2Hz, 7.1Hz, 1.3Hz), 7.87 (1H, d, J=8.2Hz), 8.16 (1H, d, J=8.2Hz), 8.36 (1H, d, J=2.1Hz), 9.11 (1H, d, J=2.1Hz).

MS m/z : 314(M^+), 313, 299, 285, 271, 255, 230, 202, 128.

実施例 5 8

3- (5-フルオロ-3-メチル-3-プロピル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン (化合物番号 1-185 番)

5 物性 : 油状物。

$^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm : 0.93 (3H, t, $J=6.3\text{Hz}$), 1.28 (3H, s), 1.46-1.72 (4H, m), 2.82 (1H, d, $J=16.4\text{Hz}$), 2.89 (1H, d, $J=16.4\text{Hz}$), 7.03 (1H, dd, $J=6.5\text{Hz}$, 2.1Hz), 7.14-7.22 (2H, m), 7.59 (1H, ddd, $J=8.2\text{Hz}$, 6.9Hz, 1.3Hz), 7.77 (1H, ddd, $J=8.2\text{Hz}$, 6.9Hz, 1.3Hz), 7.87 (1H, dd, $J=8.2\text{Hz}$, 1.3Hz), 8.15 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.35 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$), 9.10 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$).

MS m/z : 331($M-1$), 315, 303, 289, 275, 263, 248, 149.

実施例 5 9

15 3- (3-イソプロピル-3-メチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン (化合物番号 1-213 番)

物性 : ガム状。

$^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm : 0.98 (3H, d, $J=6.8\text{Hz}$), 1.11 (3H, d, $J=6.8\text{Hz}$), 1.13 (3H, s), 1.94 (1H, hept, $J=6.8\text{Hz}$), 2.74 (1H, d, $J=15.8\text{Hz}$), 2.95 (1H, d, $J=15.8\text{Hz}$), 7.21-7.28 (3H, m), 7.37-7.44 (1H, m), 7.58 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 7.76 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 7.87 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.16 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.36 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$), 9.15 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$).

MS m/z : 314(M^+), 299, 271, 255, 230.

実施例 6 0

25 3- (3-イソブチル-3-メチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン (化合物番号 1-251 番)

物性 : ガム状。

$^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm : 0.93 (3H, d, $J=6.6\text{Hz}$), 1.01 (3H, d, $J=6.6\text{Hz}$), 1.34 (3H, s), 1.40-1.62 (2H, m), 1.96 (1H, bhept, $J=6.6\text{Hz}$), 2.81 (1H, d, $J=15.8\text{Hz}$), 2.89 (1H, d, $J=15.8\text{Hz}$), 7.22-7.27 (3H, m), 7.37-

7.44 (1H, m), 7.57 (1H, ddd, $J=8.2\text{Hz}$, 6.9Hz, 1.3Hz), 7.75 (1H, ddd, $J=8.2\text{Hz}$, 6.9Hz, 1.3Hz), 7.86 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.16 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.36 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$), 9.15 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$).

MS m/z : 328(M^+), 313, 285, 271, 257, 245, 230, 128.

5 実施例 6 1

3- (3-*t*-ブチル-3-メチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン (化合物番号 1-289 番)

物性 : 油状物。

10 $^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm : 0.97 (3H, s), 1.10 (9H, s), 2.67 (1H, d, $J=15.6\text{Hz}$), 3.14 (1H, d, $J=15.6\text{Hz}$), 7.20-7.30 (3H, m), 7.37-7.42 (1H, m), 7.58 (1H, t, $J=8.4\text{Hz}$), 7.75 (1H, t, $J=8.4\text{Hz}$), 7.87 (1H, d, $J=8.4\text{Hz}$), 8.17 (1H, d, $J=8.4\text{Hz}$), 8.36 (1H, s), 9.23 (1H, s).

MS m/z : 328(M^+), 313, 271, 255, 230, 142, 128, 115.

実施例 6 2

15 3- (3-イソペンチル-3-メチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン (化合物番号 1-307 番)

物性 : ガム状。

20 $^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm : 0.86 (3H, d, $J=6.6\text{Hz}$), 0.89 (3H, d, $J=6.6\text{Hz}$), 1.25 (3H, s), 1.25-1.75 (5H, m), 2.79 (1H, d, $J=15.8\text{Hz}$), 2.88 (1H, d, $J=15.8\text{Hz}$), 7.21-7.27 (3H, m), 7.37-7.43 (1H, m), 7.58 (1H, ddd, $J=7.9\text{Hz}$, 6.9Hz, 1.3Hz), 7.76 (1H, ddd, $J=8.5\text{Hz}$, 6.9Hz, 1.3Hz), 7.87 (1H, d, $J=7.9\text{Hz}$), 8.16 (1H, d, $J=8.5\text{Hz}$), 8.36 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$), 9.12 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$).

MS m/z : 342(M^+), 341, 327, 285, 271, 257, 245, 230, 202, 128.

25 実施例 6 3

3- (3, 3-ジエチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン (化合物番号 1-345 番)

物性 : 油状物。

$^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm : 0.96 (6H, t, $J=7.4\text{Hz}$), 1.53-1.74 (4H, m),

2.82 (2H, s), 7.20-7.25 (3H, m), 7.35-7.41 (1H, m), 7.56 (1H, t, $J=8.3\text{Hz}$), 7.73 (1H, t, $J=8.3\text{Hz}$), 7.85 (1H, d, $J=8.3\text{Hz}$), 8.16 (1H, d, $J=8.3\text{Hz}$), 8.35 (1H, s), 9.16 (1H, s).

MS m/z : 314(M^+), 285, 255, 230, 128, 116.

5 実施例 6 4

3- (3-エチル-3-イソブチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン (化合物番号 1-383 番)

物性: ガム状。

10 $^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm : 0.90 (3H, d, $J=6.0\text{Hz}$), 0.98 (3H, t, $J=7.4\text{Hz}$), 1.00 (3H, d, $J=6.0\text{Hz}$), 1.44 (1H, dd, $J=14.0\text{Hz}$, 6.0Hz), 1.53 (1H, dd, $J=14.0\text{Hz}$, 6.0Hz), 1.64-1.97 (3H, m), 2.82 (1H, d, $J=15.8\text{Hz}$), 2.85 (1H, d, $J=15.8\text{Hz}$), 7.22-7.26 (3H, m), 7.37-7.44 (1H, m), 7.58 (1H, dd, $J=8.2\text{Hz}$, 7.1Hz), 7.76 (1H, dd, $J=8.2\text{Hz}$, 7.1Hz), 7.86 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.16 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.35 (1H, s), 9.16 (1H, s).

15 MS m/z : 342(M^+), 341, 327, 313, 299, 285, 271, 257, 245, 230, 202, 128.

実施例 6 5

3- (3, 3-ジプロピル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン (化合物番号 1-384 番)

物性: ガム状。

20 $^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm : 1.26 (6H, d, $J=7.1\text{Hz}$), 1.31-1.67 (8H, m), 2.83 (2H, s), 7.20-7.26 (3H, m), 7.36-7.43 (1H, m), 7.58 (1H, ddd, $J=8.2\text{Hz}$, 6.9Hz, 1.3Hz), 7.76 (1H, ddd, $J=8.2\text{Hz}$, 6.9Hz, 1.3Hz), 7.87 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.15 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.34 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$), 9.12 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$).

25 MS m/z : 342(M^+), 341, 313, 299, 285, 271, 257, 230, 149, 128.

実施例 6 6

3- (3-クロロメチル-3-メチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン (化合物番号 1-385 番)

物性: アモルファス。

¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.33 (3H, s), 2.91 (1H, d, J=16.1Hz), 3.14 (1H, d, J=16.1Hz), 3.65 (1H, d, J=10.8Hz), 3.76 (1H, d, J=10.8Hz), 7.23-7.34 (3H, m), 7.43-7.49 (1H, m), 7.60 (1H, ddd, J=8.5Hz, 7.1Hz, 1.3Hz), 7.78 (1H, ddd, J=8.5Hz, 7.1Hz, 1.3Hz), 7.88 (1H, d, J=8.5Hz), 8.17 (1H, d, J=8.5Hz), 8.38 (1H, d, J=2.1Hz), 9.11 (1H, d, J=2.1Hz).

MS m/z : 340(M⁺), 311, 269, 255, 242, 230, 149.

実施例 6 7

3 - (3 - ジクロロメチルー 3 - メチルー 3, 4 - ジヒドロイソキノリン - 1 - イル) キノリン (化合物番号 1 - 3 8 6 番)

物性 : ガム状。

¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.37 (3H, s), 3.02 (1H, d, J=15.8Hz), 3.41 (1H, d, J=15.8Hz), 6.01 (1H, s), 7.28-7.37 (3H, m), 7.44-7.51 (1H, m), 7.60 (1H, dd, J=8.2Hz, 6.9Hz), 7.78 (1H, dd, J=8.2Hz, 6.9Hz), 7.89 (1H, d, J=8.2Hz), 8.17 (1H, d, J=8.2Hz), 8.39 (1H, d, J=2.1Hz), 9.14 (1H, d, J=2.1Hz).

MS m/z : 354(M⁺), 319, 283, 271, 255, 149.

実施例 6 8

3 - (3 - トリフルオロメチルー 3 - メチルー 3, 4 - ジヒドロイソキノリン - 1 - イル) キノリン (化合物番号 1 - 3 8 7 番)

物性 : ガム状。

¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.63 (3H, s), 3.78 (1H, d, J=16.9Hz), 4.50 (1H, d, J=16.9Hz), 7.33-7.44 (2H, m), 7.55-7.65 (3H, m), 7.79 (1H ddd, J=8.2Hz, 7.1Hz, 1.3Hz), 7.87 (1H, d, J=8.2Hz), 8.18 (1H, d, J=8.2Hz), 8.35 (1H, d, J=2.1Hz), 9.12 (1H, d, J=2.1Hz).

MS m/z : 340(M⁺), 311, 269, 255, 242, 230, 149.

実施例 6 9

3 - (3 - トリフルオロエチルー 3 - メチルー 3, 4 - ジヒドロイソキノリン - 1 - イル) キノリン (化合物番号 1 - 4 2 4 番)

物性 : ガム状。

¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.44 (3H, s), 2.41 (1H, qd, J=15.1Hz, 11.6Hz), 2.60 (1H, qd, J=15.1Hz, 11.6Hz), 2.98 (1H, d, J=15.0Hz), 3.06 (1H, d, J=15.0Hz), 7.24-7.32 (3H, m), 7.43-7.49 (1H, m), 7.59 (1H, dd, J=8.2Hz, 6.9Hz), 7.78 (1H, dd, J=8.2Hz, 6.9Hz), 7.88 (1H, d, J=8.2Hz), 8.17 (1H, d, J=8.2Hz), 8.38 (1H, d, J=1.8Hz), 9.13 (1H, d, J=1.8Hz).

MS m/z : 354(M⁺), 340, 286, 272, 256, 231, 136.

実施例 7 0

3-[3, 3-ジ(クロロメチル)-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル]キノリン (化合物番号 1-212 番)

物性 : ガム状。

¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm : 3.15 (2H, s), 3.68 (2H, d, J=11.1Hz), 3.87 (2H, d, J=11.1Hz), 7.30-7.38 (3H, m), 7.45-7.53 (1H, m), 7.61 (1H, ddd, J=8.2Hz, 6.9Hz, 1.3Hz), 7.79 (1H, ddd, J=8.2Hz, 6.9Hz, 1.3Hz), 7.90 (1H, dd, J=8.2Hz, 1.3Hz), 8.17 (1H, d, J=8.2Hz), 8.41 (1H, d, J=2.1Hz), 9.14 (1H, d, J=2.1Hz).

MS m/z : 354(M⁺), 319, 305, 283, 269, 255, 229.

実施例 7 1

3-(3-メチル-3-フェニル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン (化合物番号 1-464 番)

物性 : アモルファス。

¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.60 (3H, s), 3.18 (1H, d, J=15.8Hz), 3.30 (1H, d, J=15.8Hz), 7.17-7.44 (7H, m), 7.57-7.63 (3H, m), 7.78 (1H, ddd, J=1.3, 6.9, 8.2Hz), 7.90 (1H, dd, J=1.1, 7.9Hz), 8.18 (1H, d, J=8.2Hz), 8.47 (1H, d, J=2.1Hz), 9.26 (1H, d, J=2.1Hz).

MS m/z : 348(M⁺), 333, 271, 245, 230.

実施例 7 2

3-[3-(4-フルオロフェニル)-3-メチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル]キノリン (化合物番号 1-502 番)

物性 : ガム状。

¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.57 (3H, s), 3.17 (1H, d, J=15.8Hz), 3.24 (1H, d, J=15.8Hz), 6.99 (2H, t, J=8.7Hz), 7.21-7.45 (4H, m), 7.56-7.63 (3H, m), 7.78 (1H, ddd, J=8.2Hz, 6.9Hz, 1.0Hz), 7.90 (1H, d, J=8.2Hz), 8.19 (1H, d, J=8.2Hz), 8.46 (1H, d, J=2.1Hz), 9.25 (1H, d, J=2.1Hz).

5 MS m/z : 367(M+1), 352, 272, 246, 231, 184.

実施例 7 3

3-[3-(4-クロロフェニル)-3-メチル-3,4-ジヒドロイソキノリン-1-イル]キノリン (化合物番号 1-540 番)

物性 : ガム状。

10 ¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.56 (3H, s), 3.15 (1H, d, J=15.8Hz), 3.25 (1H, d, J=15.8Hz), 7.26-7.45 (6H, m), 7.56 (2H, d, J=8.7Hz), 7.60 (1H, ddd, J=8.2Hz, 6.9Hz, 1.0Hz), 7.78 (1H, ddd, J=8.2Hz, 6.9Hz, 1.0Hz), 7.90 (1H, d, J=8.2Hz), 8.19 (1H, d, J=8.2Hz), 8.46 (1H, d, J=2.1Hz), 9.25 (1H, d, J=2.1Hz).

15 MS m/z : 383(M+1), 368, 272, 246, 231, 150.

実施例 7 4

3-(3-トリフルオロメチル-3-フェニル-3,4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン (化合物番号 1-578 番)

物性 : アモルファス。

20 ¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm : 3.57 (1H, d, J=15.8Hz), 3.64 (1H, d, J=15.8Hz), 7.18-7.30 (5H, m), 7.34-7.42 (2H, m), 7.56 (2H, d, J=7.1Hz), 7.63 (1H, ddd, J=8.2Hz, 6.9Hz, 1.3Hz), 7.79 (1H, ddd, J=8.2Hz, 6.9Hz, 1.3Hz), 7.94 (1H, d, J=8.2Hz), 8.19 (1H, d, J=8.2Hz), 8.54 (1H, d, J=2.1Hz), 9.29 (1H, d, J=2.1Hz).

25 MS m/z : 402(M⁺), 361, 333, 325, 255, 230, 166, 128.

実施例 7 5

3-[3-クロロメチル-3-(4-フルオロフェニル)-3,4-ジヒドロイソキノリン-1-イル]キノリン (化合物番号 1-594 番)

物性 : ガム状。

¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm : 3.46 (1H, d, J=16.1Hz), 3.52 (1H, d, J=16.1Hz), 3.94 (2H, s), 6.98 (2H, t, J=8.7Hz), 7.21-7.26 (2H, m), 7.36-7.47 (2H, m), 7.52-7.65 (3H, m), 7.80 (1H, ddd, J=8.5Hz, 7.1Hz, 1.3Hz), 7.91 (1H, d, J=8.5Hz), 8.18 (1H, d, J=8.5Hz), 8.44 (1H, d, J=1.8Hz), 9.24 (1H, d, J=1.8Hz).

MS m/z : 400(M⁺), 365, 351, 245, 230, 175, 128.

実施例 7 6

3-[3-クロロメチル-3-(4-クロロフェニル)-3,4-ジヒドロイソキノリン-1-イル]キノリン (化合物番号 1-632 番)

物性：ガム状。

¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm : 3.46 (1H, d, J=16.1Hz), 3.51 (1H, d, J=16.1Hz), 3.93 (2H, s), 7.22-7.28 (4H, m), 7.36-7.53 (4H, m), 7.62 (1H, ddd, J=8.2Hz, 6.9Hz, 1.3Hz), 7.80 (1H, ddd, J=8.2Hz, 6.9Hz, 1.3Hz), 7.91 (1H, d, J=8.2Hz), 8.18 (1H, d, J=8.2Hz), 8.44 (1H, d, J=2.1Hz), 9.24 (1H, d, J=2.1Hz).

MS m/z : 416(M⁺), 381, 367, 255, 245, 230, 165, 128.

実施例 7 7

3-[3-メチル-3-(3-ピリジル)-3,4-ジヒドロイソキノリン-1-イル]キノリン (化合物番号 1-670 番)

物性：ガム状。

¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.61 (3H, s), 3.23 (1H, d, J=15.6Hz), 3.28 (1H, d, J=15.6Hz), 7.22-7.47 (5H, m), 7.61 (1H, ddd, J=8.2Hz, 6.9Hz, 1.3Hz), 7.79 (1H, ddd, J=8.2Hz, 6.9Hz, 1.3Hz), 7.90 (1H, dd, J=8.2Hz, 1.3Hz), 7.99 (1H, dd, J=8.2Hz, 2.4Hz, 1.6Hz), 8.19 (1H, d, J=8.2Hz), 8.45 (1H, d, J=1.6Hz), 8.47 (1H, dd, J=2.4Hz, 1.6Hz), 8.85 (1H, d, J=2.1Hz), 9.25 (1H, d, J=2.1Hz).

MS m/z : 349(M⁺), 334, 305, 271, 245, 230, 195.

実施例 7 8

3-[3-メチル-3-(4-ピリジル)-3,4-ジヒドロイソキノリン-1-イル]キノリン (化合物番号 1-671 番)

1-イル]キノリン (化合物番号1-671番)

物性：ガム状。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.55 (3H, s), 3.03 (1H, d, J=13.8Hz), 3.18 (1H, d, J=13.8Hz), 7.27-7.46 (4H, m), 7.55 (2H, d, J=6.3Hz), 7.61 (1H, ddd, J=8.2Hz, 6.9Hz, 1.3Hz), 7.79 (1H, ddd, J=8.2Hz, 6.9Hz, 1.3Hz), 7.91 (1H, d, J=8.2Hz), 8.19 (1H, d, J=8.2Hz), 8.46 (1H, d, J=2.1Hz), 8.55 (2H, d, J=6.3Hz), 9.26 (1H, d, J=2.1Hz).

MS m/z : 349(M⁺), 334, 271, 245, 230, 175.

実施例79

3-(3-ベンジルー3-メチルー3,4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン (化合物番号1-672番)

物性：ガム状。

¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.32 (3H, s), 2.74 (1H, d, J=15.8Hz), 2.84 (1H, d, J=13.0Hz), 2.87 (1H, d, J=15.8Hz), 2.93 (1H, d, J=13.0Hz), 7.18-7.31 (8H, m), 7.41-7.47 (1H, m), 7.59 (1H, dd, J=8.2Hz, 6.9Hz), 7.77 (1H, dd, J=8.2Hz, 6.9Hz), 7.88 (1H, d, J=8.2Hz), 8.17 (1H, d, J=8.2Hz), 8.39 (1H, d, J=2.1Hz), 9.16 (1H, d, J=2.1Hz).

MS m/z : 362(M⁺), 361, 341, 313, 299, 271, 255, 230.

実施例80

1'-キノリン-3-イル-4'-H-スピロ[シクロペンタン-1,3'-イソキノリン] (化合物番号1-710番)

物性：油状物。

¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.55-1.96 (8H, m), 2.91 (2H, s), 7.19-7.26 (3H, m), 7.29-7.38 (1H, m), 7.58 (1H, t, J=8.5Hz), 7.76 (1H, t, J=8.5Hz), 7.87 (1H, d, J=8.5Hz), 8.15 (1H, d, J=8.5Hz), 8.37 (1H, d, J=2.3Hz), 9.13 (1H, d, J=2.3Hz).

MS m/z : 312(M⁺), 311, 283, 270, 230, 149, 128, 115.

実施例81

5'-フルオロー-1'-キノリン-3-イル-4'-H-スピロ[シクロペンタ

ン-1, 3'-イソキノリン] (化合物番号1-720番)

物性：油状物。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.74-1.98 (8H, m), 2.93 (2H, s), 7.04 (1H, d, J=7.6Hz), 7.17-7.23 (2H, m), 7.59 (1H, t, J=8.2Hz) 7.77 (1H, ddd, J=1.4, 6.9, 8.2Hz), 7.87 (1H, d, J=8.2Hz), 8.16 (1H, d, J=8.2Hz), 8.35 (1H, d, J=2.1Hz), 9.12 (1H, d, J=2.1Hz).

MS m/z : 330(M⁺), 301, 288, 273, 248, 149.

実施例 8 2

6'-フルオロ-1'-キノリン-3-イル-4'-H-スピロ[シクロペンタン-1, 3'-イソキノリン] (化合物番号1-721番)

物性：油状物。

¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.70-1.99 (8H, m), 2.89 (2H, s), 6.91 (1H, td, J=2.6, 8.6Hz), 6.99 (1H, dd, J=2.3, 8.6Hz), 7.21 (1H, dd, J=5.6, 8.6Hz), 7.58 (1H, t, J=7.9Hz) 7.75 (1H, t, J=8.2Hz), 7.86 (1H, d, J=7.9Hz), 8.15 (1H, d, J=8.2Hz), 8.34 (1H, d, J=2.0Hz), 9.11 (1H, d, J=2.0Hz).

MS m/z : 330(M⁺), 301, 288, 273, 248, 149.

実施例 8 3

7'-フルオロ-1'-キノリン-3-イル-4'-H-スピロ[シクロペンタン-1, 3'-イソキノリン] (化合物番号1-722番)

物性：油状物。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.70-1.98 (8H, m), 2.87 (2H, s), 6.94 (1H, dd, J=2.7, 8.9Hz), 7.12 (1H, td, J=2.7, 8.2Hz), 7.24-7.26 (1H, m), 7.60 (1H, t, J=8.2Hz), 7.78 (1H, t, J=8.2Hz), 7.89 (1H, d, J=8.2Hz), 8.17 (1H, d, J=8.2Hz), 8.35 (1H, d, J=2.1Hz), 9.13 (1H, d, J=2.1Hz).

MS m/z : 330(M⁺), 301, 288, 273, 248.

実施例 8 4

6'-フルオロ-1'-(4-メチルキノリン)-3-イル-4'-H-スピロ[シクロペンタン-1, 3'-イソキノリン] (化合物番号1-723番)

物性：油状物。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.77-1.96 (8H, m), 2.56 (3H, s), 2.96 (2H, s), 6.69-6.85 (2H, m), 6.98 (1H, dd, J=2.1, 8.9Hz), 7.61 (1H, ddd, J=1.4, 6.9, 7.6Hz), 7.75 (1H, ddd, J=1.4, 6.9, 8.2Hz), 8.07 (1H, d, J=7.6Hz), 8.14 (1H, d, J=8.2Hz), 8.73 (1H, s).

MS m/z : 344(M⁺), 343, 329, 170, 156, 128.

実施例 8 5

5' - クロロ - 1' - キノリン - 3 - イル - 4' H - スピロ [シクロペンタン - 1, 3' - イソキノリン] (化合物番号 1 - 7 2 4 番)

物性：油状物。

¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.69-2.00 (8H, m), 3.02 (2H, s), 7.12-7.22 (2H, m), 7.48 (1H, dd, J=1.3, 7.7Hz), 7.59 (1H, ddd, J=1.3, 6.9, 7.9Hz), 7.77 (1H, ddd, J=1.3, 6.9, 8.2Hz), 7.87 (1H, d, J=7.9Hz), 8.16 (1H, d, J=8.2Hz), 8.34 (1H, d, J=2.1Hz), 9.09 (1H, d, J=2.1Hz).

MS m/z : 346(M⁺), 311, 304, 279, 264, 231.

実施例 8 6

1' - キノリン - 3 - イル - 4' H - スピロ [シクロヘキサン - 1, 3' - イソキノリン] (化合物番号 1 - 7 4 9 番)

物性：油状物。

¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.51-1.54 (6H, m), 1.74-1.81 (4H, m), 2.85 (2H, s), 7.23-7.28 (3H, m), 7.37-7.42 (1H, m), 7.56 (1H, t, J=8.0Hz), 7.75 (1H, t, J=8.0Hz), 7.86 (1H, d, J=8.0Hz), 8.15 (1H, d, J=8.0Hz), 8.36 (1H, d, J=2.0Hz), 9.18 (1H, d, J=2.0Hz).

MS m/z : 326(M⁺), 283, 230, 128, 115.

実施例 8 7

1' - (4 - メチルキノリン) - 3 - イル - 4' H - スピロ [シクロヘキサン - 1, 3' - イソキノリン] (化合物番号 1 - 7 5 5 番)

物性：油状物。

¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.54-1.80 (10H, m), 2.61 (3H, s), 2.95 (2H,

s), 6.84 (1H, d, $J=7.6\text{Hz}$), 7.10–7.36 (3H, m), 7.60 (1H, t, $J=8.0\text{Hz}$), 7.73 (1H, t, $J=8.0\text{Hz}$), 8.06 (1H, d, $J=8.0\text{Hz}$), 8.14 (1H, d, $J=8.0\text{Hz}$), 8.77 (1H, s).

MS m/z : 340(M^+), 339, 325, 311, 297, 285, 257, 244.

5 実施例 8 8

5' -フルオロ-1' -キノリン-3-イル-4' H-スピロ[シクロヘキサ
ン-1, 3' -イソキノリン] (化合物番号 1-759 番)

物性: 油状物。

10 $^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm : 1.55–1.83 (10H, m), 2.88 (2H, s), 7.07 (1H, d, $J=6.6\text{Hz}$), 7.19–7.27 (2H, m), 7.60 (1H, t, $J=8.0\text{Hz}$), 7.78 (1H, t, $J=8.0\text{Hz}$), 7.88 (1H, d, $J=8.0\text{Hz}$), 8.17 (1H, d, $J=8.0\text{Hz}$), 8.36 (1H, d, $J=2.0\text{Hz}$), 9.16 (1H, d, $J=2.0\text{Hz}$).

MS m/z : 344(M^+), 301, 288, 275, 263, 248, 220.

実施例 8 9

15 6' -フルオロ-1' -キノリン-3-イル-4' H-スピロ[シクロヘキサ
ン-1, 3' -イソキノリン] (化合物番号 1-760 番)

物性: 油状物。

20 $^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm : 1.51–1.85 (10H, m), 2.84 (2H, s), 6.88–7.00 (2H, m), 7.21–7.26 (1H, m), 7.59 (1H, t, $J=8.4\text{Hz}$), 7.76 (1H, t, $J=8.4\text{Hz}$), 7.87 (1H, d, $J=8.4\text{Hz}$), 8.16 (1H, d, $J=8.4\text{Hz}$), 8.35 (1H, s), 9.14 (1H, s).

MS m/z : 344(M^+), 315, 301, 288, 248, 220.

実施例 9 0

25 7' -フルオロ-1' -キノリン-3-イル-4' H-スピロ[シクロヘキサ
ン-1, 3' -イソキノリン] (化合物番号 1-761 番)

物性: 油状物。

$^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm : 1.55–1.81 (10H, m), 2.81 (2H, s), 6.95–7.26 (3H, m), 7.60 (1H, t, $J=8.0\text{Hz}$), 7.77 (1H, t, $J=8.0\text{Hz}$), 7.88 (1H, d, $J=8.0\text{Hz}$), 8.17 (1H, d, $J=8.0\text{Hz}$), 8.36 (1Hs), 9.17 (1H, s).

MS m/z : 344 (M^+), 315, 301, 288, 275, 262, 248, 220, 156, 128.

実施例 9 1

6'-フルオロ-1'-(4-メチルキノリン)-3-イル-4'-H-スピロ[シクロヘキサン-1, 3'-イソキノリン] (化合物番号 1-762 番)

5 物性：油状物。

$^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm : 1.55-1.80 (10H, m), 2.55 (3H, s), 2.92 (2H, s), 6.80-6.84 (2H, m), 6.97 (1H, d, $J=7.3\text{Hz}$), 7.60 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 7.74 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 8.06 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.13 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.74 (1H, s).

10 MS m/z : 358 (M^+), 357, 343, 315, 168, 140, 129, 114.

実施例 9 2

6'-クロロ-1'-キノリン-3-イル-4'-H-スピロ[シクロヘキサン-1, 3'-イソキノリン] (化合物番号 1-764 番)

物性：油状物。

15 $^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm : 1.47-1.85 (10H, m), 2.83 (2H, s), 7.16-7.27 (3H, m), 7.59 (1H, t, $J=8.3\text{Hz}$), 7.76 (1H, t, $J=8.3\text{Hz}$), 7.87 (1H, d, $J=8.3\text{Hz}$), 8.16 (1H, d, $J=8.3\text{Hz}$), 8.34 (1H, d, $J=2.0\text{Hz}$), 9.14 (1H, d, $J=2.0\text{Hz}$).

MS m/z : 362 ($M^+ + 2$), 360 (M^+), 317, 304, 264, 141, 128, 115.

20 実施例 9 3

7'-クロロ-1'-キノリン-3-イル-4'-H-スピロ[シクロヘキサン-1, 3'-イソキノリン] (化合物番号 1-765 番)

物性：油状物。

25 $^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm : 1.55-1.87 (12H, m), 2.85 (2H, s), 7.20-7.26 (3H, m), 7.37-7.39 (1H, m), 7.58 (1H, t, $J=8.6\text{Hz}$), 7.75 (1H, t, $J=8.6\text{Hz}$), 7.87 (1H, d, $J=8.6\text{Hz}$), 8.15 (1H, d, $J=8.6\text{Hz}$), 8.36 (1H, d, $J=2.0\text{Hz}$), 9.14 (1H, d, $J=2.0\text{Hz}$).

MS m/z : 362 ($M^+ + 2$), 360 (M^+), 317, 304, 264, 229, 128, 115.

実施例 9 4

6' -クロロ-1' - (4-メチルキノリン) - 3-イル-4' H-スピロ
[シクロヘキサン-1, 3' -イソキノリン] (化合物番号1-766番)

物性：油状物。

¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.55-1.81 (10H, m), 2.54 (3H, s), 2.91 (2H, s), 6.78 (1H, d, J=8.2Hz), 7.10-7.29 (2H, m), 7.61 (1H, t, J=8.2Hz), 7.74 (1H, t, J=8.2Hz), 8.07 (1H, d, J=8.2Hz), 8.14 (1H, d, J=8.2Hz), 8.74 (1H, s).

MS m/z : 376(M⁺+2), 374(M⁺), 373, 357, 331, 170, 141, 115.

実施例 9 5

6' -ブromo-1' - キノリン-3-イル-4' H-スピロ[シクロヘキサン-1, 3' -イソキノリン] (化合物番号1-764番)

物性：油状物。

¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.50-1.84 (10H, m), 2.81 (2H, s), 7.11 (1H, d, J=8.1Hz), 7.38 (1H, d, J=8.1Hz), 7.42 (1H, s), 7.57 (1H, t, J=8.3Hz), 7.75 (1H, t, J=8.3Hz), 7.85 (1H, d, J=8.3Hz), 8.15 (1H, d, J=8.3Hz), 8.33 (1H, d, J=2.0Hz), 9.15 (1H, d, J=2.0Hz).

MS m/z : 406(M⁺+2), 404(M⁺), 375, 361, 349, 325, 268, 229, 141, 128, 115.

実施例 9 6

5' -メチル-1' - キノリン-3-イル-4' H-スピロ[シクロヘキサン-1, 3' -イソキノリン] (化合物番号1-771番)

物性：油状物。

¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.52-1.86 (10H, m), 2.39 (3H, s), 2.80 (2H, s), 7.06-7.16 (2H, m), 7.26-7.30 (1H, m), 7.57 (1H, t, J=8.0Hz), 7.75 (1H, t, J=8.0Hz), 7.86 (1H, d, J=8.0Hz), 8.15 (1H, d, J=8.0Hz), 8.35 (1H, s), 9.14 (1H, s).

MS m/z : 340(M⁺), 297, 284, 244, 149, 128, 115.

実施例 9 7

7' -メチル-1' - キノリン-3-イル-4' H-スピロ[シクロヘキサン-1, 3' -イソキノリン] (化合物番号1-773番)

物性：油状物。

$^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm : 1.51-1.84 (10H, m), 2.27 (3H, s), 2.81 (2H, s), 7.03 (1H, s), 7.16 (1H, d, $J=7.6\text{Hz}$), 7.26 (1H, d, $J=7.6\text{Hz}$), 7.58 (1H, t, $J=8.0\text{Hz}$), 7.76 (1H, t, $J=8.0\text{Hz}$), 7.89 (1H, d, $J=8.0\text{Hz}$), 8.16 (1H, d, $J=8.0\text{Hz}$), 8.38 (1H, s), 9.15 (1H, s).

MS m/z : 340(M^+), 325, 311, 297, 284, 271, 258, 244, 142, 128.

実施例 9 8

6'-メチル-1'-(4-メチルキノリン)-3-イル-4'-H-スピロ[シクロヘキサン-1, 3'-イソキノリン] (化合物番号 1-774 番)

物性：油状物。

$^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm : 1.53-1.80 (10H, m), 2.35 (3H, s), 2.55 (3H, s), 2.88 (2H, s), 6.72 (1H, d, $J=7.9\text{Hz}$), 6.92 (1H, d, $J=7.9\text{Hz}$), 7.06 (1H, s), 7.58 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 7.71 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 8.05 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.13 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.76 (1H, s).

MS m/z : 354(M^+), 353, 339, 311, 298, 168, 149, 115.

実施例 9 9

6'-シアノ-1'-キノリン-3-イル-4'-H-スピロ[シクロヘキサン-1, 3'-イソキノリン] (化合物番号 1-786 番)

物性：油状物。

$^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm : 1.47-1.84 (10H, m), 2.88 (2H, s), 7.37 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 7.55-7.78 (3H, m), 7.81 (1H, t, $J=8.0\text{Hz}$), 7.88 (1H, d, $J=8.0\text{Hz}$), 8.16 (1H, d, $J=8.0\text{Hz}$), 8.33 (1H, d, $J=2.0\text{Hz}$), 9.14 (1H, d, $J=2.0\text{Hz}$).

MS m/z : 351(M^+), 322, 308, 295, 270, 255, 227.

実施例 1 0 0

1'-キノリン-3-イル-4'-H-スピロ[シクロヘプタン-1, 3'-イソキノリン] (化合物番号 1-789 番)

物性：油状物。

$^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm : 1.55-1.87 (12H, m), 2.85 (2H, s), 7.20-

7.26 (3H, m), 7.37-7.39 (1H, m), 7.58 (1H, t, $J=8.6\text{Hz}$), 7.75 (1H, t, $J=8.6\text{Hz}$), 7.87 (1H, d, $J=8.6\text{Hz}$), 8.15 (1H, d, $J=8.6\text{Hz}$), 8.36 (1H, d, $J=2.0\text{Hz}$), 9.14 (1H, d, $J=2.0\text{Hz}$).

MS m/z : 340(M^+), 283, 271, 230, 149, 128, 115.

5 実施例 101

1'-キノリン-3-イル-4'-H-スピロ[(3-メチルシクロペンタン)-1, 3'-イソキノリン] (化合物番号 1-774 番)

物性: 油状物。

10 $^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm : 1.06-2.89 (10H, s), 2.93 (2H, s), 7.19-7.307 (3H, m), 7.38-7.44 (1H, m), 7.58 (1H, t, $J=8.3\text{Hz}$), 7.76 (1H, t, $J=8.3\text{Hz}$), 7.88 (1H, d, $J=8.3\text{Hz}$), 8.17 (1H, d, $J=8.3\text{Hz}$), 8.37 (1H, s), 9.14 (1H, s).

MS m/z : 326(M^+), 325, 311, 297, 283, 271, 230, 128, 115.

実施例 102

15 1-キノリン-3-イル-2', 3', 5', 6'-テトラヒドロ-4H-スピロ[イソキノリン-3, 4'-ピラン] (化合物番号 1-791 番)

物性: 油状物。

20 $^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm : 1.72-1.76 (4H, m), 2.84 (2H, s), 3.76-3.83 (2H, m), 4.05-4.14 (2H, m), 7.19-7.30 (3H, m), 7.40-7.45 (1H, m), 7.58 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 7.76 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 7.87 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.15 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.38 (1H, s), 9.20 (1H, s).

MS m/z : 328(M^+), 299, 283, 271, 255, 230, 128, 115.

実施例 103

25 3-(5-フルオロ-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン 塩酸塩 (化合物番号 1-793 番)

物性: アモルファス。

$^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm : 1.78 (6H, s), 3.31 (2H, brs), 7.26-7.47 (1H, m), 7.54 (2H, brs), 7.91 (1H, brs), 8.12 (1H, brs), 8.37 (1H, brs), 8.62 (1H, brs), 9.41 (1H, brs), 9.87 (1H, brs).

実施例 104

3-(5-フルオロ-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン 硫酸塩 (化合物番号 1-796 番)

物性: アモルファス。

- 5 $^1\text{H-NMR}$ (500MHz, D_2O) δ ppm: 1.51 (6H, s), 3.26 (2H, s), 7.25 (1H, d, $J=7.6\text{Hz}$) 7.42 (1H, td, $J=5.5, 7.6\text{Hz}$), 7.58 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 7.95 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 8.19 (1H, ddd, $J=1.4, 6.9, 8.2\text{Hz}$), 8.25 (1H, d, $J=8.9\text{Hz}$), 8.26 (1H, d, $J=8.9\text{Hz}$), 9.27 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$), 9.29 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$).

実施例 105

- 10 3-(5-フルオロ-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン 硝酸塩 (化合物番号 1-799 番)

融点: 190~193°C。

- 15 $^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.63 (6H, s), 3.18 (2H, s), 7.29 (1H, d, $J=7.6\text{Hz}$) 7.45-7.53 (2H, m), 7.75-7.78 (1H, m), 7.96-7.99 (1H, m), 8.10 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.26 (1H, d, $J=8.9\text{Hz}$), 9.06-9.07 (2H, m).

実施例 106

3-(5-フルオロ-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン シュウ酸塩 (化合物番号 1-802 番)

物性: アモルファス。

- 20 $^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.48 (6H, s), 3.03 (2H, s), 7.14 (1H, dd, $J=3.4, 5.5\text{Hz}$), 7.33-7.35 (2H, m), 7.70 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 7.89 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 7.96 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 8.28 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.68 (1H, s), 9.12 (1H, d, $J=1.4\text{Hz}$).

実施例 107

- 25 3-(5-フルオロ-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン メタンスルホン酸塩 (化合物番号 1-804 番)

融点: 227~230°C。

- $^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.77 (6H, s), 2.76 (6H, s), 3.31 (2H, s), 7.26-7.27 (1H, m) 7.51-7.59 (2H, m), 7.95 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 8.16 (1H,

ddd, $J=1.4, 6.9, 8.2\text{Hz}$), 8.42 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.55 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 9.40 (1H, s), 9.91 (1H, s).

実施例 108

3-(5-フルオロ-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン サリチル酸塩 (化合物番号 1-806 番)

物性：油状物。

$^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm : 1.42 (6H, s), 2.93 (2H, s), 6.83-6.86 (1H, m) 6.94 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 7.05 (1H, d, $J=6.9\text{Hz}$), 7.22-7.29 (2H, m), 7.39-7.45 (1H, m), 7.64 (1H, dd, $J=6.9, 8.2\text{Hz}$), 7.83 (1H, ddd, $J=1.4, 6.9, 8.9\text{Hz}$), 7.88-7.90 (1H, m), 7.91 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.29 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.54 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$), 9.18 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$).

実施例 109

3-(5-フルオロ-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン フマル酸塩 (化合物番号 1-807 番)

融点：146~149°C。

$^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.26 (6H, s), 2.84 (2H, s), 6.63 (4H, s), 7.14 (1H, dd, $J=1.4, 7.6\text{Hz}$), 7.35-7.43 (2H, m), 7.68 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 7.84 (1H, ddd, $J=1.4, 6.9, 8.2\text{Hz}$), 8.09-8.12 (2H, m), 8.50 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$), 9.04 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$), 13.13 (2H, br s)

実施例 110

3-(5-フルオロ-3, 3-ジメチル-1, 2, 3, 4-テトラヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン (化合物番号 2-36 番)

融点：142~144°C。

$^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm : 1.27 (3H, s), 1.35 (3H, s), 2.74 (1H, d, $J=16.5\text{Hz}$), 2.86 (1H, d, $J=16.5\text{Hz}$), 5.35 (1H, s), 6.51 (1H, d, $J=7.9\text{Hz}$), 6.87-7.03 (2H, m), 7.54 (1H, t, $J=7.9\text{Hz}$), 7.70 (1H, t, $J=7.9\text{Hz}$), 7.79 (1H, d, $J=7.9\text{Hz}$), 8.09 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$), 8.10 (1H, d, $J=7.9\text{Hz}$), 8.84 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$).

MS m/z : 306(M⁺), 291, 248, 220, 178, 162.

実施例 1 1 1

3-(5-フルオロ-1, 3, 3-トリメチル-1, 2, 3, 4-テトラヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン (化合物番号 2-37 番)

5 融点 : 148~150°C。

¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.01 (3H, s), 1.39 (3H, s), 2.15 (3H, s), 2.84 (1H, d, J=16.3Hz), 2.86 (1H, d, J=16.3Hz), 4.59 (1H, s), 6.43 (1H, d, J=7.7Hz), 6.78-6.91 (2H, m), 7.53 (1H, t, J=8.2Hz), 7.68 (1H, t, J=8.2Hz), 7.80 (1H, d, J=8.2Hz), 8.06 (1H, d, J=1.8Hz), 8.08 (1H, d, J=8.2Hz), 8.81 (1H, d, J=1.8Hz).

10 MS m/z : 320(M⁺), 305, 248, 192, 176, 161.

実施例 1 1 2

3-(5-クロロ-3, 3-ジメチル-1, 2, 3, 4-テトラヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン (化合物番号 2-40 番)

15 融点 : 129~131°C。

¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.26 (3H, s), 1.35 (3H, s), 2.78 (1H, d, J=16.5Hz), 2.92 (1H, d, J=16.5Hz), 5.34 (1H, s), 6.63 (1H, d, J=8.2Hz), 6.94 (1H, t, J=8.2Hz), 7.25 (1H, d, J=8.2Hz), 7.52 (1H, t, J=7.6Hz), 7.69 (1H, t, J=7.6Hz), 7.77 (1H, d, J=7.6Hz), 8.08 (1H, d, J=2.1Hz), 8.10 (1H, d, J=8.2Hz), 8.83 (1H, d, J=2.1Hz).

20 MS m/z : 322(M⁺), 307, 264, 230, 194, 178, 130, 115.

実施例 1 1 3

3-(5-クロロ-1, 3, 3-トリメチル-1, 2, 3, 4-テトラヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン (化合物番号 2-41 番)

25 融点 : 142~144°C。

¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm : 1.00 (3H, s), 1.40 (3H, s), 2.14 (3H, s), 2.95 (1H, d, J=15.8Hz), 2.97 (1H, d, J=15.8Hz), 4.60 (1H, s), 6.56 (1H, d, J=7.9Hz), 6.88 (1H, t, J=7.9Hz), 7.11 (1H, d, J=7.9Hz), 7.53 (1H, t, J=8.2Hz), 7.68 (1H, t, J=8.2Hz), 7.79 (1H, d, J=8.2Hz), 8.05 (1H, d,

$J=2.0\text{Hz}$), 8.08 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.79 (1H, d, $J=2.0\text{Hz}$).

MS m/z : 336 (M^+), 323, 321, 264, 230, 208, 192, 142.

実施例 114

3- (5-フルオロ-3, 3, 4, 4-テトラメチル-3, 4-ジヒドロイソ
キノリン-1-イル) キノリン (化合物番号 1-866 番)

物性: アモルファス。

$^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm : 1.33 (6H, s), 1.46 (6H, d, $J=3.4\text{Hz}$), 6.96 (1H, dd, $J=6.6, 2.1\text{Hz}$), 7.15-7.20 (2H, m), 7.59 (1H, t, 7.5Hz), 7.76 (1H, dt, $J=11.0, 3.8\text{Hz}$), 7.87 (1H, d, $J=7.9\text{Hz}$), 8.16 (1H, d, $J=8.5\text{Hz}$), 8.31 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$), 9.03 (1H, d, $J=1.8\text{Hz}$).

MS m/z : 332 (M^+), 317, 289, 275, 260, 233, 146.

実施例 115

3- (3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) -2-
メチルキノリン (化合物番号 1-14 番)

物性: 油状物。

$^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.37 (6H, s), 2.58 (3H, s), 2.91 (2H, s), 6.85 (1H, d, $J=7.4\text{Hz}$), 7.14 (1H, t, $J=7.4\text{Hz}$), 7.26 (1H, d, $J=7.4\text{Hz}$), 7.38 (1H, t, $J=7.4\text{Hz}$), 7.51 (1H, t, $J=7.7\text{Hz}$), 7.71 (1H, t, $J=7.7\text{Hz}$), 7.80 (1H, d, $J=7.7\text{Hz}$), 8.06 (1H, s), 8.07 (1H, d, $J=7.7\text{Hz}$).

MS m/z : 300 (M^+), 299, 285, 269, 257, 244, 229.

実施例 116

3- (5-エチル-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-
イル) キノリン (化合物番号 1-73 番)

物性: 油状物。

$^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.25 (3H, t, $J=7.7\text{Hz}$), 1.34 (6H, s), 2.77 (2H, q, $J=7.7\text{Hz}$), 2.83 (2H, s), 7.05 (1H, d, $J=7.7\text{Hz}$), 7.16 (1H, t, $J=7.7\text{Hz}$), 7.32 (1H, d, $J=7.7\text{Hz}$), 7.57 (1H, ddd, $J=1.1, 6.6, 8.2\text{Hz}$), 7.77 (1H, ddd, $J=1.1, 6.6, 8.2\text{Hz}$), 7.86 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.15 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.36 (1H, d, $J=2.2\text{Hz}$), 9.08 (1H, d, $J=2.2\text{Hz}$)

MS m/z: 314(M⁺), 313, 299, 285, 269, 242, 229, 128.

実施例 1 1 7

1 - (3, 3-ジメチル-1-キノリン-3-イル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-5-イル) メタノン=0-メチルオキシム (化合物番号 1-99 番)

5 実施例 1 1 8 の化合物の立体異性体

物性: 油状物。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm: 1.34 (6H, s), 2.96 (2H, s), 4.03 (3H, s), 7.23-7.27 (2H, m), 7.59 (1H, ddd, J=1.1, 7.1, 8.2Hz), 7.77 (1H, ddd, J=1.6, 6.6, 8.2Hz), 7.85-7.88 (2H, m), 8.16 (1H, d, J=8.2Hz), 8.35 (1H, d, J=2.2Hz), 8.42 (1H, s), 9.07 (1H, d, J=2.2Hz).

MS m/z: 343(M⁺), 328, 312, 296, 285, 269, 255, 128.

実施例 1 1 8

1 - (3, 3-ジメチル-1-キノリン-3-イル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-5-イル) メタノン=0-メチルオキシム (化合物番号 1-99 番)

15 実施例 1 1 7 の化合物の立体異性体

物性: 油状物。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm: 1.33 (6H, s), 2.84 (2H, s), 4.00 (3H, s), 7.23-7.29 (2H, m), 7.59 (1H, ddd, J=1.1, 7.1, 8.2Hz), 7.63 (1H, s), 7.75-7.78 (2H, s), 7.87 (1H, d, J=8.2Hz), 8.16 (1H, d, J=8.8Hz), 8.37 (1H, d, J=2.2Hz), 9.09 (1H, d, J=2.2Hz).

MS m/z: 343(M⁺), 328, 312, 296, 285, 269, 255, 128.

実施例 1 1 9

3 - (3, 3, 4-トリメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン (化合物番号 1-856 番)

25 物性: 油状物。

¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm: 1.29 (3H, s), 1.31 (6H, s), 2.86 (1H, q, J=7.0 Hz), 7.15-7.28 (2H, m), 7.33 (1H, d, J=7.4Hz), 7.42 (1H, t, J=6.4Hz), 7.58 (1H, t, J=7.5 Hz), 7.75 (1H, t, J=7.3 Hz), 7.87 (1H, d, J=7.9 Hz), 8.16 (1H, d, J=8.5 Hz), 8.38 (1H, d, J=2.0 Hz), 9.11

(1H, d, $J = 1.6$ Hz).

MS m/z : 300(M^+), 285, 269, 244, 230, 215, 135, 115.

実施例 1 2 0

3 - (5 - フルオロ - 3, 3, 4 - トリメチル - 3, 4 - ジヒドロイソキノリン - 1 - イル) キノリン (化合物番号 1 - 8 5 7 番)

物性: 油状物。

$^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.09 (3H, s), 1.20 (3H, d, $J = 7.1$ Hz), 1.62 (3H, s), 3.17 (1H, q, $J = 7.1$), 7.00-7.06 (1H, m), 7.15-7.24 (2H, m), 7.59 (1H, t, $J = 7.5$), 7.79 (1H, t, $J = 7.6$ Hz), 7.88 (1H, d, $J = 7.7$ Hz), 8.17 (1H, d, $J = 8.5$ Hz), 8.36 (1H, d, $J = 1.8$ Hz), 9.09 (1H, d, $J = 2.1$ Hz).

MS m/z : 318(M^+), 317, 303, 287, 265, 247, 233, 144, 133, 101, 84.

実施例 1 2 1

3 - (5 - クロロ - 3, 3, 4 - トリメチル - 3, 4 - ジヒドロイソキノリン - 1 - イル) キノリン (化合物番号 1 - 8 5 8 番)

物性: 油状物。

$^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.07 (3H, s), 1.18 (3H, d, $J = 6.9$ Hz), 1.63 (3H, s), 3.23 (1H, q, $J = 7.1$ Hz), 7.10-7.20 (2H, m), 7.49 (1H, d, $J = 7.4$ Hz), 7.59 (1H, t, $J = 7.5$ Hz), 7.76 (1H, t, $J = 7.7$ Hz), 7.87 (1H, d, $J = 7.9$ Hz), 8.16 (1H, d, $J = 8.5$ Hz), 8.35 (1H, d, $J = 1.8$), 9.08 (1H, d, $J = 1.6$ Hz).

MS m/z : 334(M^+), 319, 303, 278, 263, 242, 152, 128, 101.

実施例 1 2 2

3 - (3, 3, 4, 4 - テトラメチル - 3, 4 - ジヒドロイソキノリン - 1 - イル) - キノリン (化合物番号 1 - 8 6 5 番)

物性: 油状物。

$^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.28 (6H, s), 1.35 (6H, s), 2.04 (2H, s), 7.15-7.26 (2H, m), 7.48 (2H, d, $J = 3.2$ Hz), 7.58 (1H, t, $J = 7.5$ Hz), 7.76 (1H, t, $J = 7.4$ Hz), 7.87 (1H, d, $J = 7.7$ Hz), 8.16 (1H, d, $J = 8.4$ Hz), 8.36 (1H, d, $J = 2.1$ Hz), 9.10 (1H, d, $J = 1.6$ Hz).

MS m/z : 314(M^+), 299, 257, 242, 142, 128, 115.

実施例 1 2 3

3- (5-クロロ-3, 3, 4, 4-テトラメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン (化合物番号 1-867 番)

物性: アモルファス。

- 5 $^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.33 (6H, br s), 1.59 (6H, s), 7.07 (1H, dd, $J=1.6, 7.7\text{Hz}$), 7.13 (1H, t, $J=7.7\text{Hz}$), 7.48 (1H, dd, $J=1.6, 7.7\text{Hz}$), 7.59 (1H, ddd, $J=1.1, 6.6, 8.2\text{Hz}$), 7.76 (1H, ddd, $J=1.1, 6.6, 8.2\text{Hz}$), 7.86 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.15 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.28 (1H, d, $J=2.2\text{Hz}$), 8.99 (1H, d, $J=2.2\text{Hz}$).

- 10 MS m/z: 348(M^+), 347, 333, 305, 276, 256, 128.

実施例 1 2 4

3- (5-フルオロ-3, 3, 4-トリメチル-1, 2, 3, 4-テトラヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン (化合物番号 2-255 番)

物性: 融点 133-134°C。

- 15 $^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.22 (3H, s), 1.26 (3H, s), 1.40 (3H, d, $J=6.9\text{Hz}$), 2.92 (1H, q, $J=6.6\text{Hz}$), 5.31 (1H, s), 6.50 (1H, d, $J=7.7\text{Hz}$), 6.85-7.03 (2H, m), 7.54 (1H, t, $J=7.5\text{Hz}$), 7.70 (1H, t, $J=7.4\text{Hz}$), 7.80 (1H, d, $J=7.9\text{Hz}$), 8.09 (1H, d, $J=2.1$), 8.01 (1H, d, $J=7.7\text{Hz}$), 8.86 (1H, d, $J=1.8\text{Hz}$).

- 20 MS m/z: 320(M^+), 305, 263, 248, 162.

実施例 1 2 5

3- (5-フルオロ-3, 3, 4, 4-テトラメチル-1, 2, 3, 4-テトラヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン (化合物番号 2-264 番)

物性: 融点 179-181°C。

- 25 $^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.19 (3H, s), 1.31 (3H, s), 1.46 (3H, d, $J=4.8\text{Hz}$), 1.55 (3H, s), 5.38 (1H, s), 6.45 (1H, d, $J=7.4\text{Hz}$), 6.82-6.98 (2H, m), 7.53 (1H, t, $J=7.9\text{Hz}$), 7.69 (1H, t, $J=8.4\text{Hz}$), 7.79 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.05 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$), 8.08 (1H, d, $J=8.7\text{Hz}$), 8.78 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$).

MS m/z: 334(M⁺), 332, 319, 277, 262, 248, 149, 133.

実施例 1 2 6

3- (5-イソプロピル-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン (化合物番号 1-880 番)

5 物性: 油状物。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm: 1.30 (6H, d, J=6.6Hz), 1.34 (6H, s), 2.87 (2H, s), 3.27 (1H, sep, J=6.6Hz), 7.05 (1H, d, J=7.7Hz), 7.20 (1H, t, J=7.7Hz), 7.43 (1H, d, J=7.7Hz), 7.58 (1H, ddd, J=1.1, 6.6, 8.2Hz), 7.76 (1H, ddd, J=1.1, 6.6, 8.2Hz), 7.87 (1H, d, J=8.2Hz), 8.16 (1H, d, J=8.2Hz), 8.36 (1H, d, J=2.2Hz), 9.08 (1H, d, J=2.2Hz).

10 MS m/z: 328(M⁺), 327, 313, 297, 285, 271, 256, 128.

実施例 1 2 7

3- {5- (1-メチルプロピル) -3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル} キノリン (化合物番号 1-881 番)

15 物性: 油状物。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm: 0.90 (3H, t, J=7.1Hz), 1.27 (3H, d, J=7.1Hz), 1.33 (3H, s), 1.35 (3H, s), 1.62-1.72 (2H, m), 2.84 (1H, d, J=15.4Hz), 2.88 (1H, d, J=15.4Hz), 3.02 (1H, sep, J=7.1Hz), 7.04 (1H, d, J=7.7Hz), 7.20 (1H, t, J=7.7Hz), 7.37 (1H, d, J=7.7Hz), 7.57 (1H, t, J=7.7Hz), 7.59 (1H, ddd, J=1.1, 7.1, 8.2Hz), 7.87 (1H, d, J=7.7Hz), 8.16 (1H, d, J=8.2Hz), 8.36 (1H, d, J=2.2Hz), 9.09 (1H, d, J=2.2Hz).

20 MS m/z: 342(M⁺), 341, 327, 313, 297, 285, 271, 128.

実施例 1 2 8

3- {5- (1-メチルビニル) -3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル} キノリン (化合物番号 1-882 番)

25

物性: 油状物。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm: 1.30 (6H, s), 2.09 (3H, s), 2.85 (2H, s), 4.91-4.92 (1H, m), 5.31-5.32 (1H, m), 7.11 (1H, dd, J=1.1, 7.7Hz), 7.19 (1H, t, J=7.7Hz), 7.30 (1H, dd, J=1.1, 7.7Hz), 7.58 (1H, ddd, J=1.1, 6.6,

8.2Hz), 7.76 (1H, ddd, $J=1.1$, 6.6, 8.2Hz), 7.87 (1H, d, $J=8.2$ Hz), 8.16 (1H, d, $J=8.2$ Hz), 8.39 (1H, d, $J=2.2$ Hz), 9.11 (1H, d, $J=2.2$ Hz).

MS m/z : 326(M^+), 311, 295, 285, 270, 254, 128.

実施例 1 2 9

- 5 3 - { 5 - (2 - メトキシカルボニルビニル) - 3 , 3 - ジメチル - 3 , 4 - ジヒドロイソキノリン - 1 - イル } キノリン (化合物番号 1 - 8 8 3 番)

物性 : 油状物。

- 10 $^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.35 (6H, s), 2.98 (2H, s), 3.86 (3H, s), 6.45 (1H, d, $J=15.9$ Hz), 7.25-7.29 (2H, m), 7.59 (1H, ddd, $J=1.1$, 7.1, 8.2Hz), 7.70 (1H, dd, $J=1.6$, 7.1Hz), 7.77 (1H, ddd, $J=1.1$, 6.6, 7.7Hz), 7.88 (1H, d, $J=8.2$ Hz), 8.06 (1H, d, $J=15.9$ Hz), 8.16 (1H, d, $J=8.8$ Hz), 8.36 (1H, d, $J=2.2$ Hz), 9.07 (1H, d, $J=2.2$ Hz).

MS m/z : 370(M^+), 355, 339, 320, 305, 295, 254, 127.

実施例 1 3 0

- 15 3 - (5 - フルオロメチル - 3 , 3 - ジメチル - 3 , 4 - ジヒドロイソキノリン - 1 - イル) キノリン (化合物番号 1 - 8 8 4 番)

物性 : 油状物。

- 20 $^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.36 (6H, s), 2.91 (2H, s), 5.52 (2H, d, $J=47.8$ Hz), 7.25-7.29 (2H, m), 7.49-7.51 (1H, m), 7.59 (1H, ddd, $J=1.1$, 6.6, 8.2Hz), 7.77 (1H, ddd, $J=1.1$, 6.6, 8.2Hz), 7.88 (1H, d, $J=8.2$ Hz), 8.16 (1H, d, $J=8.2$ Hz), 8.37 (1H, d, $J=2.2$ Hz), 9.08 (1H, d, $J=2.2$ Hz).

MS m/z : 318(M^+), 303, 285, 269, 262, 242, 128.

実施例 1 3 1

- 25 3 - (5 - クロロメチル - 3 , 3 - ジメチル - 3 , 4 - ジヒドロイソキノリン - 1 - イル) キノリン (化合物番号 1 - 8 8 5 番)

物性 : 油状物。

- $^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.37 (6H, s), 2.95 (2H, s), 4.69 (2H, s), 7.21-7.26 (2H, m), 7.47 (1H, dd, $J=2.2$, 7.1Hz), 7.59 (1H, ddd, $J=1.1$, 7.1, 8.2Hz), 7.77 (1H, ddd, $J=1.1$, 7.1, 8.2Hz), 7.87 (1H, d, $J=8.2$ Hz),

8.16 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.36 (1H, d, $J=2.2\text{Hz}$), 9.08 (1H, d, $J=2.2\text{Hz}$).

MS m/z : 334(M^+), 319, 299, 285, 269, 262, 242, 128.

実施例 1 3 2

5 3- (5-ジフルオロメチルー3, 3-ジメチルー3, 4-ジヒドロイソキノ
リン-1-イル) キノリン (化合物番号 1-886 番)

物性: 油状物。

$^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.36 (6H, s), 2.98 (2H, s), 6.86 (1H, t, $J=55.5\text{Hz}$), 7.32-7.36 (2H, m), 7.60 (1H, ddd, $J=1.1, 6.6, 8.2\text{Hz}$), 7.65 (1H, dd, $J=2.2, 6.6\text{Hz}$), 7.76 (1H, ddd, $J=1.1, 6.6, 8.2\text{Hz}$), 7.88 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.17 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.36 (1H, d, $J=2.2\text{Hz}$), 9.08 (1H, d, $J=2.2\text{Hz}$).

MS m/z : 336(M^+), 321, 285, 255, 229.

実施例 1 3 3

15 3- (5-ヒドロキシメチルー3, 3-ジメチルー3, 4-ジヒドロイソキノ
リン-1-イル) キノリン (化合物番号 1-887 番)

物性: アモルファス。

$^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.35 (6H, s), 2.92 (2H, s), 4.82 (2H, s), 7.17 (1H, d, $J=7.1\text{Hz}$), 7.24 (1H, t, $J=7.1\text{Hz}$), 7.51 (1H, d, $J=7.1\text{Hz}$), 7.59 (1H, ddd, $J=1.1, 6.6, 8.2\text{Hz}$), 7.77 (1H, ddd, $J=1.1, 6.6, 8.2\text{Hz}$), 7.87 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.16 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.36 (1H, d, $J=2.2\text{Hz}$), 9.05 (1H, d, $J=2.2\text{Hz}$).

MS m/z : 316(M^+), 297, 285, 269, 255, 242, 128.

実施例 1 3 4

25 3- { 5- (1-ヒドロキシ-1-メチルエチル) -3, 3-ジメチルー
3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル } キノリン (化合物番号 1-
888 番)

物性: 油状物。

$^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.32 (6H, s), 1.73 (6H, s), 3.10 (1H, br s), 3.29 (2H, s), 7.02 (1H, dd, $J=1.1, 7.7\text{Hz}$), 7.15 (1H, t, $J=7.7\text{Hz}$), 7.57-

7.60 (2H, m), 7.76 (1H, ddd, $J=1.1, 7.1, 8.2\text{Hz}$), 7.87 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$),
8.16 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.38 (1H, d, $J=1.6\text{Hz}$), 8.78 (1H, br s).

MS m/z : 344(M^+), 325, 311, 285, 270, 254.

実施例 1 3 5

- 5 3- (5-メトキシメチル-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン (化合物番号 1-889 番)

物性: アモルファス。

$^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.34 (6H, s), 2.88 (2H, s), 3.45 (3H, s),
4.56 (2H, s), 7.17 (1H, d, $J=7.1\text{Hz}$), 7.22 (1H, t, $J=7.1\text{Hz}$), 7.47 (1H, d,
10 $J=7.1\text{Hz}$), 7.58 (1H, ddd, $J=1.1, 7.1, 8.2\text{Hz}$), 7.76 (1H, ddd, $J=1.1, 7.1,$
8.2Hz), 7.87 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.16 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.35 (1H, d,
 $J=2.2\text{Hz}$), 9.08 (1H, d, $J=2.2\text{Hz}$).

MS m/z : 330(M^+), 315, 297, 285, 268, 256, 242, 128.

実施例 1 3 6

- 15 3- (5-メトキシカルボニルメチル-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン (化合物番号 1-890 番)

物性: 油状物。

$^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.34 (6H, s), 2.83 (2H, s), 3.73 (3H, s),
3.76 (2H, s), 7.16 (1H, d, $J=7.7\text{Hz}$), 7.21 (1H, t, $J=7.7\text{Hz}$), 7.36 (1H, d,
20 $J=7.7\text{Hz}$), 7.59 (1H, ddd, $J=1.1, 7.1, 8.2\text{Hz}$), 7.76 (1H, ddd, $J=1.1, 7.1,$
8.2Hz), 7.87 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.16 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.36 (1H, d,
 $J=2.2\text{Hz}$), 9.09 (1H, d, $J=2.2\text{Hz}$).

MS m/z : 358(M^+), 357, 343, 285, 269, 242, 128.

実施例 1 3 7

- 25 3- (5-ベンゾイルアミノ-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン (化合物番号 1-891 番)

物性: 油状物。

$^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.35 (6H, s), 2.79 (2H, s), 7.14 (1H, d,
 $J=7.7\text{Hz}$), 7.31 (1H, t, $J=7.7\text{Hz}$), 7.54-7.64 (4H, m), 7.77 (1H, ddd, $J=1.1,$

6.6, 8.2Hz), 7.86-7.89 (3H, m), 7.96 (2H, d, $J=7.1\text{Hz}$), 8.16 (1H, d, $J=8.8\text{Hz}$), 8.38 (1H, d, $J=2.2\text{Hz}$), 9.11 (1H, d, $J=2.2\text{Hz}$).

MS m/z : 405 (M^+), 390, 349, 299, 285, 269.

実施例 138

5 3- { 5- (2-フルオロベンゾイルアミノ) -3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル } キノリン (化合物番号 1-892 番)

物性: アモルファス。

$^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.36 (6H, s), 2.81 (2H, s), 7.13 (1H, d, $J=7.7\text{Hz}$), 7.24-7.28 (1H, m), 7.32 (1H, t, $J=7.7\text{Hz}$), 7.38 (1H, d, $J=7.7\text{Hz}$), 7.57-7.61 (2H, m), 7.77 (1H, ddd, $J=1.1, 6.6, 8.2\text{Hz}$), 7.88 (1H, d, $J=7.7\text{Hz}$), 8.06 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.17 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.25 (1H, td, $J=2.2, 7.7\text{Hz}$), 8.38 (1H, d, $J=2.2\text{Hz}$), 8.50 (1H, d, $J=6.5\text{Hz}$), 9.11 (1H, d, $J=2.2\text{Hz}$).

MS m/z : 423 (M^+), 408, 367, 328, 313, 300, 285, 269.

15 実施例 139

3- { 5- (3-フルオロベンゾイルアミノ) -3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル } キノリン (化合物番号 1-893 番)

物性: 油状物。

$^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.34 (6H, s), 2.77 (2H, s), 7.15 (1H, d, $J=7.7\text{Hz}$), 7.28-7.32 (2H, m), 7.49-7.54 (1H, m), 7.60 (1H, ddd, $J=1.1, 6.6, 8.2\text{Hz}$), 7.64-7.68 (1H, m), 7.73 (1H, d, $J=7.7\text{Hz}$), 7.75-7.77 (2H, m), 7.88 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.05 (1H, br s), 8.16 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.38 (1H, d, $J=1.6\text{Hz}$), 9.10 (1H, d, $J=1.6\text{Hz}$).

MS m/z : 423 (M^+), 408, 367, 328, 313, 300, 285, 269.

25 実施例 140

3- { 5- (4-フルオロベンゾイルアミノ) -3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル } キノリン (化合物番号 1-894 番)

物性: アモルファス。

$^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.34 (6H, s), 2.77 (2H, s), 7.14 (1H, d,

$\text{J}=7.7\text{Hz}$), 7.21 (2H, t, $\text{J}=8.2\text{Hz}$), 7.29 (1H, t, $\text{J}=7.7\text{Hz}$), 7.60 (1H, d, $\text{J}=7.7\text{Hz}$), 7.75-7.79 (2H, m), 7.88 (1H, d, $\text{J}=8.2\text{Hz}$), 7.94-7.99 (3H, m), 8.15 (1H, d, $\text{J}=8.8\text{Hz}$), 8.38 (1H, d, $\text{J}=1.6\text{Hz}$), 9.09 (1H, d, $\text{J}=1.6\text{Hz}$).

MS m/z : 423 (M^+), 408, 300, 285, 269.

5 実施例 1 4 1

3 - (5 - カルボキシ - 3, 3 - ジメチル - 3, 4 - ジヒドロイソキノリン - 1 - イル) キノリン (化合物番号 1 - 8 9 5 番)

物性: アモルファス。

10 $^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.36 (6H, s), 3.34 (2H, s), 7.34 (1H, t, $\text{J}=7.7\text{Hz}$), 7.41 (1H, dd, $\text{J}=1.1, 7.7\text{Hz}$), 7.63 (1H, ddd, $\text{J}=1.6, 7.1, 8.2\text{Hz}$), 7.81 (1H, ddd, $\text{J}=1.1, 7.1, 8.2\text{Hz}$), 7.91 (1H, d, $\text{J}=7.7\text{Hz}$), 8.15 (1H, dd, $\text{J}=1.6, 8.2\text{Hz}$), 8.25 (1H, d, $\text{J}=8.2\text{Hz}$), 8.44 (1H, d, $\text{J}=2.2\text{Hz}$), 9.11 (1H, d, $\text{J}=2.2\text{Hz}$).

MS m/z : 330 (M^+), 315, 297, 285, 269, 243, 128.

15 実施例 1 4 2

3 - (5 - メトキシカルボニル - 3, 3 - ジメチル - 3, 4 - ジヒドロイソキノリン - 1 - イル) - 8 - メトキシキノリン (化合物番号 1 - 8 9 6 番)

物性: 油状物。

20 $^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.33 (6H, s), 3.27 (2H, s), 3.97 (3H, s), 7.30 (1H, t, $\text{J}=7.7\text{Hz}$), 7.39 (1H, dd, $\text{J}=1.1, 7.7\text{Hz}$), 7.59 (1H, ddd, $\text{J}=1.1, 6.6, 8.2\text{Hz}$), 7.77 (1H, ddd, $\text{J}=1.6, 6.6, 8.2\text{Hz}$), 7.87 (1H, dd, $\text{J}=1.1, 8.2\text{Hz}$), 8.03 (1H, dd, $\text{J}=1.1, 7.7\text{Hz}$), 8.16 (1H, d, $\text{J}=8.2\text{Hz}$), 8.35 (1H, d, $\text{J}=2.2\text{Hz}$), 9.06 (1H, d, $\text{J}=2.2\text{Hz}$).

MS m/z : 344 (M^+), 343, 329, 313, 297, 285, 128.

25 実施例 1 4 3

3 - (5 - エトキシカルボニル - 3, 3 - ジメチル - 3, 4 - ジヒドロイソキノリン - 1 - イル) - 8 - メトキシキノリン (化合物番号 1 - 8 9 7 番)

物性: 油状物。

$^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.33 (6H, s), 1.44 (3H, t, $\text{J}=7.1\text{Hz}$), 3.27

(2H, s), 4.43 (2H, q, $J=7.1\text{Hz}$), 7.30 (1H, t, $J=7.7\text{Hz}$), 7.38 (1H, d, $J=7.7\text{Hz}$), 7.59 (1H, ddd, $J=1.1, 6.6, 8.2\text{Hz}$), 7.77 (1H, ddd, $J=1.1, 6.6, 8.2\text{Hz}$), 7.87 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.02 (1H, d, $J=7.7\text{Hz}$), 8.16 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.35 (1H, d, $J=2.2\text{Hz}$), 9.05 (1H, d, $J=2.2\text{Hz}$).

5 MS m/z : 358(M^+), 357, 343, 329, 313, 297, 285, 128.

実施例 1 4 4

3-(5-アミノカルボニル-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン (化合物番号 1-898 番)

物性: 融点 236-240°C.

10 $^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.34 (6H, s), 3.09 (2H, s), 5.84 (2H, br s), 7.28-7.34 (2H, m), 7.60 (1H, ddd, $J=1.1, 7.1, 8.2\text{Hz}$), 7.64 (1H, dd, $J=1.6, 7.1\text{Hz}$), 7.78 (1H, ddd, $J=1.6, 7.1, 8.2\text{Hz}$), 7.88 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.16 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.36 (1H, d, $J=2.2\text{Hz}$), 9.06 (1H, d, $J=2.2\text{Hz}$).

MS m/z : 329(M^+), 314, 297, 285, 269, 242, 128.

15 実施例 1 4 5

3-(5-フルオロ-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)-2-メチルキノリン (化合物番号 1-899 番)

物性: 油状物。

20 $^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.39 (6H, s), 2.57 (3H, s), 2.92 (2H, s), 6.68 (1H, d, $J=7.1\text{Hz}$), 7.11-7.15 (2H, m), 7.52 (1H, t, $J=7.7\text{Hz}$), 7.72 (1H, t, $J=7.7\text{Hz}$), 7.80 (1H, d, $J=7.7\text{Hz}$), 8.05 (1H, s), 8.06 (1H, d, $J=7.7\text{Hz}$).

MS m/z : 318(M^+), 317, 303, 262.

実施例 1 4 6

25 3-(5-フルオロ-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)-4-メチルキノリン (化合物番号 1-900 番)

物性: アモルファス。

$^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.42 (6H, s), 2.56 (3H, s), 2.95 (2H, s), 6.69 (1H, d, $J=7.1\text{Hz}$), 7.11-7.15 (2H, m), 7.62 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 7.75

(1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 8.07 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.15 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.74 (1H, s).

MS m/z : 318(M^+), 317, 303, 287, 262, 247.

実施例 1 4 7

5 3- (5-フルオロ-3, 3, 4-トリメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) -2-メチルキノリン (化合物番号 1-901 番)

物性: 油状物。

$^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.17 (3H, s), 1.25 (3H, d, $J=7.1\text{Hz}$), 1.59 (3H, s), 2.58 (3H, s), 3.21 (1H, q, $J=7.1\text{Hz}$), 6.67 (1H, d, $J=7.1\text{Hz}$),
10 7.09-7.17 (2H, m), 7.52 (1H, t, $J=7.7\text{Hz}$), 7.73 (1H, t, $J=7.7\text{Hz}$), 7.81 (1H, d, $J=7.7\text{Hz}$), 8.07 (2H, d, $J=7.7\text{Hz}$).

MS m/z : 332(M^+), 331, 317, 301, 287, 274.

実施例 1 4 8

15 3- (5-フルオロ-3, 3, 4-トリメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) -8-メチルキノリン (化合物番号 1-902 番)

物性: 油状物。

$^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.09 (3H, s), 1.20 (3H, d, $J=7.1\text{Hz}$), 1.61 (3H, s), 2.85 (3H, s), 3.17 (1H, q, $J=7.1\text{Hz}$), 7.04 (1H, dd, $J=1.6, 6.0\text{Hz}$), 7.18-7.21 (2H, m), 7.48 (1H, t, $J=7.7\text{Hz}$), 7.61 (1H, d, $J=7.7\text{Hz}$),
20 7.73 (1H, d, $J=7.7\text{Hz}$), 8.35 (1H, d, $J=2.2\text{Hz}$), 9.10 (1H, d, $J=2.2\text{Hz}$).

MS m/z : 332(M^+), 317, 301, 289, 276, 261.

実施例 1 4 9

25 3- (5-フルオロ-3, 3, 4-トリメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) -8-メトキシキノリン (化合物番号 1-903 番)

物性: 油状物。

$^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.09 (3H, s), 1.20 (3H, d, $J=7.1\text{Hz}$), 1.61 (3H, s), 3.17 (1H, q, $J=7.1\text{Hz}$), 4.12 (3H, s), 6.98 (1H, t, $J=4.4\text{Hz}$), 7.11 (1H, d, $J=7.1\text{Hz}$), 7.17-7.19 (2H, m), 7.46 (1H, d, $J=7.7\text{Hz}$), 7.51 (1H, t, $J=7.7\text{Hz}$), 8.37 (1H, d, $J=1.6\text{Hz}$), 9.04 (1H, d, $J=1.6\text{Hz}$).

MS m/z: 348(M⁺), 333, 317, 305, 292, 277, 262, 248.

実施例 150

3-(6-フルオロ-3,3,4,4-テトラメチル-3,4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン (化合物番号1-904番)

5 物性: 油状物。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm: 1.29 (6H, br s), 1.34 (6H, s), 6.88 (1H, td, J=2.2, 8.2Hz), 7.17-7.20 (2H, m), 7.59 (1H, ddd, J=1.1, 7.1, 8.2Hz), 7.77 (1H, ddd, J=1.6, 7.1, 8.2Hz), 7.88 (1H, d, J=8.2Hz), 8.16 (1H, d, J=8.2Hz), 8.35 (1H, d, J=2.2Hz), 9.08 (1H, d, J=2.2Hz).

10 MS m/z: 332(M⁺), 317, 289, 275, 260.

実施例 151

3-(7-フルオロ-3,3,4,4-テトラメチル-3,4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン (化合物番号1-905番)

物性: アモルファス。

15 ¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm: 1.29 (6H, br s), 1.34 (6H, s), 6.88 (1H, dd, J=2.7, 8.8Hz), 7.17 (1H, ddd, J=2.7, 8.2, 8.8Hz), 7.45 (1H, dd, J=4.9, 8.2Hz), 7.60 (1H, ddd, J=1.1, 7.1, 8.2Hz), 7.78 (1H, ddd, J=1.6, 7.1, 8.2Hz), 7.89 (1H, d, J=8.2Hz), 8.17 (1H, d, J=8.2Hz), 8.35 (1H, d, J=2.2Hz), 9.11 (1H, d, J=2.2Hz).

20 MS m/z: 332(M⁺), 317, 301, 289, 275, 260.

実施例 152

3-(5-フルオロ-3,3,4,4-テトラメチル-3,4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)-2-メチルキノリン (化合物番号1-906番)

物性: 油状物。

25 ¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm: 1.35 (6H, s), 1.50 (6H, s), 2.56 (3H, s), 6.65 (1H, dd, J=1.6, 7.1Hz), 7.08-7.14 (2H, m), 7.51 (1H, t, J=8.2Hz), 7.71 (1H, t, J=8.2Hz), 7.80 (1H, d, J=8.2Hz), 8.03 (1H, s), 8.06 (1H, d, J=8.2Hz).

MS m/z: 346(M⁺), 331, 316, 303, 290, 274.

実施例 1 5 3

3- (5-フルオロ-3, 3, 4, 4-テトラメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) -4-メチルキノリン (化合物番号 1-907 番)

物性: 油状物。

5 $^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.27-1.33 (6H, m), 1.50 (6H, s), 2.54 (3H, s), 6.65 (1H, dd, $J=1.6, 7.1\text{Hz}$), 7.08-7.13 (2H, m), 7.61 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 7.74 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 8.06 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.14 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.70 (1H, s).

MS m/z : 346 (M^+), 331, 316, 303, 290, 274.

10 実施例 1 5 4

3- (6-クロロ-3, 3, 4, 4-テトラメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン (化合物番号 1-908 番)

物性: 油状物。

15 $^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.29 (6H, br s), 1.34 (6H, s), 7.13 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 7.20 (1H, dd, $J=2.2, 8.2\text{Hz}$), 7.47 (1H, d, $J=2.2\text{Hz}$), 7.60 (1H, ddd, $J=1.1, 6.6, 8.2\text{Hz}$), 7.77 (1H, ddd, $J=1.1, 6.6, 8.2\text{Hz}$), 7.88 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.17 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.34 (1H, d, $J=2.2\text{Hz}$), 9.08 (1H, d, $J=2.2\text{Hz}$).

MS m/z : 348 (M^+), 333, 317, 305, 292, 277, 256, 128.

20 実施例 1 5 5

3- (7-クロロ-3, 3, 4, 4-テトラメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン (化合物番号 1-909 番)

物性: 油状物。

25 $^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.28 (6H, br s), 1.34 (6H, s), 7.15 (1H, d, $J=1.6\text{Hz}$), 7.42-7.46 (2H, m), 7.61 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 7.78 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 7.90 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.18 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.35 (1H, d, $J=2.2\text{Hz}$), 9.09 (1H, d, $J=2.2\text{Hz}$).

MS m/z : 348 (M^+), 333, 317, 305, 292, 277, 256, 128.

実施例 1 5 6

3-(5-フルオロ-3,3,4,4-テトラメチル-3,4-ジヒドロイン
キノリン-1-イル)キノリン 塩酸塩 (化合物番号1-910番)

物性: 融点 123-135°C。

5 $^1\text{H-NMR}$ (500MHz, DMSO- d_6) δ ppm: 1.46 (12H, s), 7.37-7.43 (1H, m), 7.53-
7.57 (1H, m), 7.74-7.78 (1H, m), 7.81 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 8.02 (1H, t,
 $J=8.2\text{Hz}$), 8.21-8.22 (2H, m), 8.90 (1H, s), 9.17 (1H, s).

実施例 157

3-(5-フルオロ-3,3,4,4-テトラメチル-3,4-ジヒドロイン
キノリン-1-イル)キノリン 硫酸塩 (化合物番号1-911番)

10 物性: アモルファス。

$^1\text{H-NMR}$ (500MHz, DMSO- d_6) δ ppm: 1.46 (12H, s), 7.37-7.43 (1H, m), 7.53-
7.57 (1H, m), 7.74-7.78 (1H, m), 7.81 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 8.01 (1H, t,
 $J=8.2\text{Hz}$), 8.21 (2H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.86 (1H, s), 9.16 (1H, s).

実施例 158

15 3-(5-フルオロ-3,3,4,4-テトラメチル-3,4-ジヒドロイン
キノリン-1-イル)キノリン 硝酸塩 (化合物番号1-912番)

物性: 融点 165-170°C。

20 $^1\text{H-NMR}$ (500MHz, DMSO- d_6) δ ppm: 1.41 (6H, s), 1.45 (6H, s), 7.31-7.38 (1H,
m), 7.48-7.55 (1H, m), 7.60-7.77 (1H, m), 7.79 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 7.98
(1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 8.19 (2H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.78 (1H, s), 9.13 (1H, s).

実施例 159

25 3-(5-フルオロ-3,3,4,4-テトラメチル-3,4-ジヒドロイン
キノリン-1-イル)キノリン メタンスルホン酸塩 (化合物番号1-
913番)

物性: 融点 185-190°C。

$^1\text{H-NMR}$ (500MHz, DMSO- d_6) δ ppm: 1.47 (12H, s), 2.32 (3H, s), 7.41-7.43
(1H, m), 7.55-7.59 (1H, m), 7.74-7.78 (1H, m), 7.82 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$),
8.03 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 8.22 (2H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.90 (1H, s), 9.17 (1H, s).

実施例 160

3-(3, 3, 4, 4, 5-ペンタメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン (化合物番号1-914番)

物性: アモルファス。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm: 1.05 (3H, br s), 1.30 (3H, br s), 1.62 (6H, br s), 2.60 (3H, s), 6.99 (1H, dd, J=1.1, 7.7Hz), 7.09 (1H, t, J=7.7Hz), 7.25 (1H, d, J=7.7Hz), 7.58 (1H, ddd, J=1.1, 6.6, 8.2Hz), 7.75 (1H, ddd, J=1.1, 6.6, 8.2Hz), 7.86 (1H, d, J=8.2Hz), 8.15 (1H, d, J=8.2Hz), 8.30 (1H, d, J=2.2Hz), 9.00 (1H, d, J=2.2Hz).

MS m/z: 328(M⁺), 313, 285, 271, 256, 241, 128.

実施例161

3-(3, 3, 4, 4, 6-ペンタメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン (化合物番号1-915番)

物性: 油状物。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm: 1.28 (6H, br s), 1.34 (6H, s), 2.42 (3H, s), 7.01 (1H, d, J=7.7Hz), 7.05 (1H, d, J=7.7Hz), 7.20 (1H, s), 7.58 (1H, ddd, J=1.1, 6.6, 8.2Hz), 7.75 (1H, ddd, J=1.1, 6.6, 8.2Hz), 7.87 (1H, d, J=8.2Hz), 8.16 (1H, d, J=8.2Hz), 8.35 (1H, d, J=2.2Hz), 9.09 (1H, d, J=2.2Hz).

MS m/z: 328(M⁺), 313, 297, 285, 256, 241, 128.

実施例162

3-(3, 3, 4, 4, 7-ペンタメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン (化合物番号1-916番)

物性: 油状物。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm: 1.28 (6H, br s), 1.36 (6H, s), 2.25 (3H, s), 6.96 (1H, s), 7.29 (1H, d, J=7.7Hz), 7.37 (1H, d, J=7.7Hz), 7.59 (1H, ddd, J=1.1, 6.6, 8.2Hz), 7.77 (1H, ddd, J=1.1, 6.6, 8.2Hz), 7.89 (1H, d, J=8.2Hz), 8.16 (1H, d, J=8.2Hz), 8.38 (1H, d, J=2.2Hz), 9.09 (1H, d, J=2.2Hz).

MS m/z: 328(M⁺), 313, 297, 285, 256, 241, 128.

実施例 1 6 3

3-(5-フルオロ-3, 3, 4, 4-テトラメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)-6-フルオロキノリン (化合物番号 1-917 番)

物性: 油状物。

- 5 $^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.33 (6H, s), 1.46 (6H, s), 6.95 (1H, dd, $J=1.6, 7.5\text{Hz}$), 7.15-7.21 (2H, m), 7.46-7.55 (2H, m), 8.16 (1H, dd, $J=4.9, 8.8\text{Hz}$), 8.27 (1H, d, $J=2.2\text{Hz}$), 9.00 (1H, d, $J=2.2\text{Hz}$).

MS m/z : 350(M^+), 335, 319, 307, 293, 278.

実施例 1 6 4

- 10 3-(5-フルオロ-3, 3, 4, 4-テトラメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)-8-フルオロキノリン (化合物番号 1-918 番)

物性: 油状物。

- 15 $^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.33 (6H, s), 1.46 (6H, s), 6.97 (1H, d, $J=7.1\text{Hz}$), 7.15-7.21 (2H, m), 7.42-7.54 (2H, m), 7.67 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.37 (1H, s), 9.09 (1H, s).

MS m/z : 350(M^+), 335, 319, 307, 293, 278.

実施例 1 6 5

3-(5-フルオロ-3, 3, 4, 4-テトラメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)-8-メチルキノリン (化合物番号 1-919 番)

- 20 物性: 油状物。

$^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.32 (6H, s), 1.46 (6H, s), 2.84 (3H, s), 6.99 (1H, d, $J=6.6\text{Hz}$), 7.11-7.17 (2H, m), 7.45 (1H, t, $J=7.7\text{Hz}$), 7.58 (1H, d, $J=7.6\text{Hz}$), 7.70 (1H, d, $J=7.6\text{Hz}$), 8.30 (1H, d, $J=1.6\text{Hz}$), 9.06 (1H, d, $J=1.6\text{Hz}$).

- 25 MS m/z : 346(M^+), 331, 315, 303, 289, 274.

実施例 1 6 6

3-(5-フルオロ-3, 3, 4, 4-テトラメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)-8-メトキシキノリン (化合物番号 1-920 番)

物性: 油状物。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm: 1.32 (6H, s), 1.46 (6H, s), 4.12 (3H, s), 6.93 (1H, d, J=7.1Hz), 7.11 (1H, d, J=7.1Hz), 7.14-7.17 (2H, m), 7.45 (1H, d, J=7.7Hz), 7.51 (1H, t, J=7.7Hz), 8.33 (1H, d, J=2.2Hz), 8.98 (1H, d, J=2.2Hz).

5 MS m/z: 362(M⁺), 347, 331, 319, 306, 290, 276, 260.

実施例 167

3', 3'-ジメチルー1'-キノリン-3-イル-3'H-スピロ[シクロペンタン-1, 4'-イソキノリン] (化合物番号1-921番)

物性: 油状物。

10 ¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm: 0.65 (3H, s), 1.26 (3H, s), 1.34-1.96 (6H, m), 2.35-2.37 (1H, m), 2.78-2.80 (1H, m), 7.23-7.49 (4H, m), 7.57 (1H, t, J=7.6Hz), 7.75 (1H, t, J=7.6Hz), 7.87 (1H, d, J=7.6Hz), 8.16 (1H, d, J=7.6Hz), 8.39 (1H, d, J=2.2Hz), 9.22 (1H, d, J=2.2Hz).

MS m/z: 340(M⁺), 325, 311, 283, 271, 257.

15 実施例 168

4', 4'-ジメチルー1'-キノリン-3-イル-4'H-スピロ[シクロペンタン-1, 4'-イソキノリン] (化合物番号1-922番)

物性: 油状物。

20 ¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm: 0.94-1.90 (14H, m), 7.18 (2H, d, J=3.3Hz), 7.46 (2H, d, J=3.3Hz), 7.56 (1H, t, J=7.6Hz), 7.73 (1H, t, J=7.6Hz), 7.86 (1H, d, J=7.6Hz), 8.18 (1H, d, J=7.6Hz), 8.35 (1H, d, J=2.2Hz), 9.11 (1H, d, J=2.2Hz).

MS m/z: 340(M⁺), 325, 311, 285, 271, 257.

実施例 169

25 3', 3'-ジメチルー1'-キノリン-3-イル-3'H-スピロ[シクロヘキサン-1, 4'-イソキノリン] (化合物番号1-923番)

物性: 油状物。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm: 0.86-1.90 (16H, m), 7.17 (1H, d, J=7.3Hz), 7.22 (1H, t, J=7.3Hz), 7.45 (1H, t, J=8.2Hz), 7.59 (1H, t, J=8.2Hz),

7.73-7.78 (2H, m), 7.89 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.19 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.42 (1H, d, $J=2.2\text{Hz}$), 9.18 (1H, d, $J=2.2\text{Hz}$).

MS m/z : 354(M^+), 339, 325, 311, 297, 268, 257.

実施例 170

- 5 4', 4'-ジメチルー1'-キノリン-3-イル-4'-*H*-スピロ[シクロヘキサ
ン-1, 4'-イソキノリン] (化合物番号1-924番)

物性: 油状物。

- 10 $^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.24-1.85 (16H, m), 7.22 (1H, t, $J=7.1\text{Hz}$),
7.27 (1H, d, $J=7.1\text{Hz}$), 7.44-7.48 (2H, m), 7.56 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 7.74
(1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 7.87 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.18 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.40 (1H,
d, $J=2.2\text{Hz}$), 9.28 (1H, d, $J=2.2\text{Hz}$).

MS m/z : 354(M^+), 339, 311, 273, 257, 242.

実施例 171

- 15 1'-キノリン-3-イル-4'-*H*-スピロ[シクロブタン-1, 4'-イソキノ
ン] (化合物番号1-925番)

物性: 油状物。

- 20 $^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.88-2.20 (4H, m), 2.32-2.46 (2H, m), 3.08
(2H, s), 7.04 (1H, d, $J=6.6\text{Hz}$), 7.17-7.25 (2H, m), 7.59 (1H, t, $J=7.5\text{Hz}$),
7.77 (1H, t, $J=10.7\text{Hz}$), 7.88 (1H, d, $J=7.9\text{Hz}$), 8.16 (1H, d, $J=8.5\text{Hz}$),
8.39 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$), 9.14 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$).

MS m/z : 316(M^+), 315, 287, 273, 247, 144.

実施例 172

3-(5-フルオロ-4-ケト-3, 3-ジメチルー3, 4-ジヒドロイソキノ
ノリン-1-イル) キノリン (化合物番号1-934番) (E工程)

- 25 3-(5-フルオロ-3, 3-ジメチルー3, 4-ジヒドロイソキノリン-
1-イル) キノリン (5.0 g、16.4 ミリモル) の酢酸 (50 mL) 溶液に、クロム
酸 (4.9 g) を加え、14時間加熱環流した後、水、亜硫酸ナトリウム水溶液お
よび炭酸水素ナトリウム水溶液を注加した。30分攪拌後、酢酸エチルで抽出し
て得られた残渣をクロマトグラフィーに付し、目的物 0.3 g (収率6%) を得た。

物性：融点151-152°C。

¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm: 1.61 (6H, s), 7.19 (1H, d, J=7.7Hz), 7.37 (1H, t, J=9.2Hz), 7.60-7.74 (2H, m), 7.81 (1H, t, J=6.6Hz), 7.91 (1H, d, J=7.9Hz), 8.19 (1H, d, J=8.5Hz), 8.37 (1H, d, J=2.4Hz), 9.09 (1H, d, J=2.4Hz).

実施例 173

3-(5-フルオロ-4-ヒドロキシ-3,3-ジメチル-3,4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン(化合物番号1-935番)(F工程)

3-(5-フルオロ-4-ケト-3,3-ジメチル-3,4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン(300 mg、0.9 ミリモル)のメタノール(8 mL)溶液に、水素化ホウ素ナトリウム(103 mg)を加え、室温で2.5時間攪拌した後、水を注加し、酢酸エチルで抽出して得られた残渣をクロマトグラフィーに付し、目的物 215 mg (収率 74%) を得た。

物性：融点225-226°C。

¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm: 1.06 (3H, s), 1.75 (3H, s), 2.42 (1H, s), 4.89 (1H, s), 7.09 (1H, d, J=7.7Hz), 7.20-7.38 (2H, m), 7.59 (1H, t, J=7.0Hz), 7.77 (1H, t, J=7.0Hz), 7.86 (1H, d, J=8.2Hz), 8.15 (1H, d, J=8.5Hz), 8.36 (1H, d, J=2.1Hz), 9.07 (1H, d, J=2.1Hz).

MS m/z: 320(M⁺), 277, 263, 235, 214, 207.

実施例 174

3-(4,5-ジフルオロ-3,3-ジメチル-3,4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン(化合物番号1-927番)(G工程)

3-(5-フルオロ-4-ヒドロキシ-3,3-ジメチル-3,4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン(50 mg、0.16 ミリモル)の塩化メチレン(20 mL)溶液に、ジエチルアミノサルファー トリフルオライド(76 mg)を加え、氷冷下で1時間攪拌した後、水を注加し、酢酸エチルで抽出して得られた残渣をクロマトグラフィーに付し、目的物 45 mg (収率 90%) を得た。

物性：油状物。

¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm: 1.07 (3H, s), 1.78 (3H, d, J=1.6Hz), 5.65

(1H, d, $J=49.4\text{Hz}$), 7.17 (1H, d, $J=7.7\text{Hz}$), 7.30 (1H, t, $J=8.0\text{Hz}$), 7.42-7.54 (1H, m), 7.59 (1H, t, $J=7.6\text{Hz}$), 7.78 (1H, t, $J=7.7\text{Hz}$), 7.88 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.17 (1H, d, $J=8.5\text{Hz}$), 8.37 (1H, s), 9.13 (1H, d, $J=1.6\text{Hz}$).

MS m/z : 322(M^+), 301, 287, 266, 248, 151, 119, 84.

5 実施例 172-174 と同様にして、以下の化合物を合成した。

実施例 175

3-(5-フルオロ-3,3-ジメチル-4-メチレン-3,4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン (化合物番号 1-926 番)

物性：油状物。

10 $^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.53 (6H, s), 5.80 (2H, dd, $J=17.4, 1.8\text{Hz}$), 7.02 (1H, dt, $J=9.5, 4.2\text{Hz}$), 7.22-7.30 (2H, m), 7.59 (1H, t, $J=7.4\text{Hz}$), 7.77 (1H, t, $J=7.7\text{Hz}$), 7.87 (1H, d, $J=8.5\text{Hz}$), 8.16 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.34 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$), 9.07 (1H, d, $J=1.8\text{Hz}$).

MS m/z : 316(M^+), 301, 275, 259, 119, 84.

15 実施例 176

3-(4-クロロ-5-フルオロ-3,3-ジメチル-3,4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン (化合物番号 1-928 番)

物性：アモルファス。

20 $^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.15 (3H, s), 1.85 (3H, s), 5.35 (1H, s), 7.14 (1H, d, $J=7.7\text{Hz}$), 7.23-7.43 (2H, m), 7.60 (1H, t, $J=7.7\text{Hz}$), 7.78 (1H, t, $J=7.7\text{Hz}$), 7.88 (1H, d, $J=5.5\text{Hz}$), 8.18 (1H, d, $J=8.5\text{Hz}$), 8.39 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$), 9.14 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$).

MS m/z : 338(M^+), 303, 287, 262, 247, 151, 144, 134, 110.

実施例 177

25 3-(4,4-ジフルオロ-3,3-ジメチル-3,4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン (化合物番号 1-929 番)

物性：油状物。

$^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.46 (6H, s), 7.34 (1H, d, $J=7.7\text{Hz}$), 7.55 (1H, t, $J=7.7\text{Hz}$), 7.61 (1H, ddd, $J=1.1, 7.1, 8.2\text{Hz}$), 7.67 (1H, td, $J=1.1,$

7.7Hz), 7.80 (1H, ddd, $J=1.6, 7.1, 8.2$ Hz), 7.87-7.90 (2H, m), 8.18 (1H, d, $J=8.2$ Hz), 8.40 (1H, d, $J=2.2$ Hz), 9.14 (1H, d, $J=2.2$ Hz).

MS m/z : 322(M^+), 307, 287, 266, 230.

実施例 178

5 3-(4,4,5-トリフルオロ-3,3-ジメチル-3,4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン (化合物番号 1-930 番)

物性: 融点 126-127°C.

$^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.50 (6H, s), 7.13 (1H, d, $J=7.7$ Hz), 7.35 (1H, t, $J=9.2$ Hz), 7.48-7.64 (2H, m), 7.80 (1H, t, $J=8.5$ Hz), 7.88 (1H, d, $J=8.2$ Hz), 8.18 (1H, d, $J=1.5$ Hz), 8.35 (1H, d, $J=2.1$ Hz), 9.08 (1H, d, $J=2.4$ Hz).

MS m/z : 340(M^+), 325, 305, 284, 248, 149, 128.

実施例 179

15 3-(5-フルオロ-4-メトキシ-3,3-ジメチル-3,4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン (化合物番号 1-932 番)

物性: アモルファス。

$^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.00 (3H, s), 1.75 (3H, s), 3.38 (3H, s), 4.39 (1H, s), 7.13 (1H, d, $J=7.4$ Hz), 7.22-7.42 (2H, m), 7.58 (1H, t, $J=7.4$ Hz), 7.76 (1H, t, $J=7.4$ Hz), 7.87 (1H, d, $J=8.2$ Hz), 8.16 (1H, d, $J=8.2$ Hz), 8.39 (1H, s), 9.14 (1H, s).

MS m/z : 334(M^+), 319, 303, 287, 262, 234, 207, 190, 151, 130, 104.

実施例 180

25 3-(4-ケト-3,3-ジメチル-3,4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン (化合物番号 1-933 番)

物性: 融点 137°C.

$^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.62 (6H, s), 7.38-7.43 (1H, m), 7.58-7.68 (2H, m), 7.81 (1H, t, $J=8.2$ Hz), 7.91 (1H, d, $J=7.9$ Hz), 8.20 (1H, d, $J=7.1$ Hz), 8.37 (1H, d, $J=2.1$ Hz), 9.11 (1H, d, $J=2.1$ Hz).

MS m/z : 300(M^+), 285, 271, 257, 244, 231, 216, 189, 149, 128, 107, 94.

実施例 181

3- (5-フルオロ-4-ヒドロキシ-3, 3, 4-トリメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン (化合物番号 1-935 番)

物性: アモルファス。

- 5 $^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.25 (6H, s), 1.58 (3H, s), 1.63 (3H, s), 2.95 (1H, d, $J=10.0\text{Hz}$), 6.99 (1H, d, $J=7.1\text{Hz}$), 7.18-7.33 (2H, m), 7.59 (1H, t, $J=8.1\text{Hz}$), 7.77 (1H, t, $J=8.1\text{Hz}$), 7.87 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.16 (1H, d, $J=8.5\text{Hz}$), 8.32 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$), 9.03 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$).
MS m/z : 334(M^+), 277, 248, 234, 220, 207, 138, 128, 101.

10 実施例 182

3- (4-エチル-5-フルオロ-4-ヒドロキシ-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン (化合物番号 1-936 番)

物性: アモルファス。

- 15 $^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm: 0.91 (3H, td, $J=7.5, 1.5\text{Hz}$), 1.17 (3H, s), 1.63 (3H, s), 1.95 (2H, q, $J=7.5\text{Hz}$), 3.14 (1H, d, $J=12.4\text{Hz}$), 7.00 (1H, d, $J=4.0\text{Hz}$), 7.18-7.33 (2H, m), 7.60 (1H, t, $J=7.5\text{Hz}$), 7.77 (1H, t, $J=7.7\text{Hz}$), 7.87 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.16 (1H, d, $J=8.5\text{Hz}$), 8.32 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$), 9.04 (1H, d, $J=1.8\text{Hz}$).
20 MS m/z : 348(M^+), 291, 276, 248, 234.

実施例 183

3- (5-フルオロ-4-メトキシ-3, 3, 4-トリメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン (化合物番号 1-937 番)

物性: 油状物。

- 25 $^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.05 (3H, s), 1.69 (3H, s), 1.80 (3H, d, $J=6.1\text{Hz}$), 3.13 (3H, s), 7.07 (1H, d, $J=7.5\text{Hz}$), 7.17-7.37 (2H, m), 7.58 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 7.76 (1H, t, $J=8.5\text{Hz}$), 7.86 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.15 (1H, d, $J=8.5\text{Hz}$), 8.34 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$), 9.08 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$).
MS m/z : 348(M^+), 333, 317, 301, 292, 277, 192, 149, 136, 108, 83.

実施例 184

3-(4-エトキシ-5-フルオロ-3,3,4-トリメチル-3,4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン (化合物番号1-938番)

物性：融点118-119°C。

5 ¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm: 1.01 (3H, t, J=6.9Hz), 1.03 (3H, s), 1.69 (3H, s), 1.79 (3H, d, J=6.1Hz), 3.09 (1H, m), 3.54 (1H, m), 7.04 (1H, d, J=7.5Hz), 7.15-7.35 (2H, m), 7.58 (1H, t, J=8.0Hz), 7.76 (1H, t, J=8.5Hz), 7.87 (1H, d, J=8.2Hz), 8.15 (1H, d, J=8.5Hz), 8.33 (1H, d, J=2.1Hz), 9.04 (1H, d, J=2.1Hz).

10 MS m/z: 362(M⁺), 333, 306, 277, 248, 234, 128, 101.

実施例 185

3-(4-エチル-5-フルオロ-4-メトキシ-3,3-ジメチル-3,4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン (化合物番号1-939番)

15 物性：融点145-147°C。

¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm: 0.95 (3H, td, J=7.5, 1.9Hz), 1.31 (3H, s), 1.49 (3H, s), 1.96-2.11 (1H, m), 2.20-2.36 (1H, m), 3.49 (3H, s), 6.98 (1H, dd, J=7.3, 1.5Hz), 7.17-7.33 (2H, m), 7.59 (1H, t, J=8.0Hz), 7.76 (1H, t, J=8.6Hz), 7.86 (1H, d, J=8.5Hz), 8.15 (1H, d, J=8.7Hz), 8.29 (1H, d, J=2.1Hz), 9.01 (1H, d, J=2.1Hz).

20 MS m/z: 362(M⁺), 347, 330, 315, 305, 290, 277, 234, 192, 149, 128, 101.

実施例 186

3-(5-ヒドロキシメチル-3,3-ジメチル-1,2,3,4-テトラヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン (化合物番号2-274番)

25 物性：アモルファス。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm: 1.27 (3H, s), 1.34 (3H, s), 1.84-1.87 (1H, m), 2.81 (1H, d, J=16.5Hz), 2.88 (1H, d, J=16.5Hz), 3.73-3.76 (1H, m), 4.75 (2H, s), 5.39 (1H, s), 6.70 (1H, d, J=7.7Hz), 7.04 (1H, t, J=7.7Hz), 7.25-7.27 (1H, m), 7.53 (1H, ddd, J=1.1, 7.1, 8.2Hz), 7.70 (1H, ddd,

$J=1.6, 7.1, 8.2\text{Hz}$), 7.78 (1H, dd, $J=1.1, 8.2\text{Hz}$), $8.08\text{--}8.11$ (2H, m), 8.83 (1H, d, $J=2.2\text{Hz}$).

MS m/z : $318(M^+)$, 303, 285, 243, 230, 128.

実施例 187

- 5 3- (2-アセチル-5-フルオロ-3, 3-ジメチル-1, 2, 3, 4-テトラヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン (化合物番号 2-275 番)

物性: アモルファス。

- 10 $^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.29 (3H, s), 1.89 (3H, s), 2.31 (3H, s), 2.35 (1H, d, $J=15.4\text{Hz}$), 2.81 (1H, d, $J=15.4\text{Hz}$), 6.10-6.20 (1H, m), 7.12 (1H, t, $J=8.5\text{Hz}$), 7.33 (1H, d, $J=8.5\text{Hz}$), 7.37-7.39 (1H, m), 7.56 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 7.71 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 7.77 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 7.94 (1H, s), 8.08 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.75 (1H, s).

MS m/z : $348(M^+)$, 305, 291, 274, 263, 248.

実施例 188

- 15 3- (2-メトキシアセチル-5-フルオロ-3, 3-ジメチル-1, 2, 3, 4-テトラヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン (化合物番号 2-276 番)

実施例 189 の化合物の立体異性体

物性: 油状物。

- 20 $^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.31 (3H, s), 1.89 (3H, s), 2.31 (1H, d, $J=15.4\text{Hz}$), 2.82 (1H, d, $J=15.4\text{Hz}$), 3.41 (3H, s), 4.08 (1H, d, $J=13.2\text{Hz}$), 4.37 (1H, d, $J=13.2\text{Hz}$), 6.29 (1H, s), 7.14 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 7.33 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 7.39-7.40 (1H, m), 7.56 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 7.70-7.75 (2H, m), 7.92 (1H, s), 8.08 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.75 (1H, s).

- 25 MS m/z : $378(M^+)$, 347, 333, 305, 290, 274, 262, 248.

実施例 189

- 3- (2-メトキシアセチル-5-フルオロ-3, 3-ジメチル-1, 2, 3, 4-テトラヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン (化合物番号 2-276 番)

実施例 188 の化合物の立体異性体

物性：油状物。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm: 0.58 (3H, s), 1.21 (3H, s), 2.68 (1H, d, J=17.0 Hz), 2.91 (1H, d, J=17.0Hz), 3.26 (3H, s), 3.89 (2H, s), 5.59 (1H, s), 6.48 (1H, d, J=7.7Hz), 6.93 (1H, t, J=7.7Hz), 7.02 (1H, q, J=7.7Hz), 7.57 (1H, t, J=8.2Hz), 7.74 (1H, t, J=8.2Hz), 7.79 (1H, d, J=8.2Hz), 8.12 (1H, d, J=8.2Hz), 8.31 (1H, s), 8.91 (1H, s).

MS m/z: 378(M⁺), 306, 291, 248.

実施例 190

3-(2-シンナミル-5-フルオロ-3,3-ジメチル-1,2,3,4-テトラヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン (化合物番号 2-277番)

物性：油状物。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm: 1.14 (3H, s), 1.47 (3H, s), 3.38 (1H, dd, J=6.6, 16.5Hz), 3.52 (1H, dd, J=6.6, 16.5Hz), 3.74 (2H, s), 5.08 (1H, s), 5.98-6.02 (1H, m), 6.14 (1H, d, J=15.9Hz), 6.51 (1H, d, J=7.7Hz), 6.82 (1H, t, J=7.7Hz), 6.91-6.93 (1H, m), 7.08 (2H, d, J=7.1Hz), 7.13-7.17 (1H, m), 7.18 (2H, d, J=7.1Hz), 7.51 (1H, t, J=8.2Hz), 7.66 (1H, t, J=8.2Hz), 7.78 (1H, d, J=8.2Hz), 8.04 (1H, d, J=8.2Hz), 8.09 (1H, s), 8.87 (1H, s).

MS m/z: 422(M⁺), 407, 303, 265, 248.

実施例 191

3-(5-フルオロ-2,3,3,4,4-ペンタメチル-1,2,3,4-テトラヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン (化合物番号 2-278番)

物性：アモルファス。

¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm: 1.02 (3H, s), 1.24 (3H, s), 1.48 (3H, d, J=4.5Hz), 1.61 (3H, s), 2.12 (3H, s), 4.66 (1H, s), 6.38 (1H, d, J=7.9Hz), 6.72-6.90 (2H, m), 7.54 (1H, t, J=7.4Hz), 7.68 (1H, t, J=7.7Hz), 7.80 (1H, d, J=8.2Hz), 8.01 (1H, d, J=1.8Hz), 8.07 (1H, d, J=8.5Hz), 8.73 (1H, d, J=2.1Hz).

MS m/z: 348(M⁺), 333, 277, 262, 190, 167, 149, 133.

実施例 192

3-(5-フルオロ-4-ケト-3,3-ジメチル-1,2,3,4-テトラヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン(化合物番号2-279番)

5 物性: 融点228-229°C.

¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm: 1.06 (3H, s), 1.75 (3H, s), 4.89 (1H, s), 7.09 (1H, d, J=7.4Hz), 7.20-7.38 (2H, m), 7.59 (1H, t, J=7.0Hz), 7.76 (1H, t, J=8.4Hz), 7.86 (1H, d, J=8.2Hz), 8.15 (1H, d, J=8.5Hz), 8.36 (1H, d, J=1.8Hz), 9.07 (1H, d, J=2.1Hz).

10 MS m/z: 320(M⁺), 287, 277, 263, 235, 207.

実施例 193

5-フルオロ-3,3,4,4-テトラメチル-8b-キノリン-3-イル-4,8b-ジヒドロ-3H-オキサジレノ[3,2-a]イソキノリン(化合物番号3-100番)(H工程)

15 3-(5-フルオロ-3,3,4,4-テトラメチル-3,4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン(12.0 g、36.0 ミリモル)のメタノール(250 mL)溶液に、m-クロロ過安息香酸(9.0 g)を加え、室温で5時間攪拌した後、亜硫酸ナトリウム水溶液および炭酸水素ナトリウム水溶液を注加した。30分攪拌後、酢酸エチルで抽出して得られた残渣をクロマトグラフィーに付し、目的物
20 6.8 g(収率54%)を得た。

物性: 融点120-121°C.

¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm: 1.30 (3H, s), 1.53 (3H, s), 1.54 (3H, s), 1.56 (3H, s), 6.82-6.86 (1H, m), 7.05-7.15 (2H, m), 7.60 (1H, t, J=7.0Hz), 7.77 (1H, t, J=8.4Hz), 7.86 (1H, d, J=8.2Hz), 8.16 (1H, d, J=8.5Hz), 8.21 (1H, d, J=2.1Hz), 8.94 (1H, d, J=2.1Hz).

25 MS m/z: 348(M⁺), 331, 317, 292, 275, 260, 248, 177, 128, 101.

実施例 193と同様にして、以下の化合物を合成した。

実施例 194

5-フルオロ-3,3-ジメチル-8b-(1-オキシドキノリン-3-イ

ル) - 4, 8 b - ジヒドロ - 3 H - オキサジレノ [3, 2 - a] イソキノリン
(化合物番号 3 - 3 8 番)

物性: 融点 164-166°C。

¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm: 1.15 (3H, s), 1.57 (3H, s), 2.58 (1H, d, J=16.1Hz), 2.93 (1H, d, J=16.1Hz), 6.94 (1H, t, J=4.7Hz), 7.11-7.23 (2H, m), 7.70 (1H, t, J=7.6Hz), 7.82 (1H, t, J=7.5Hz), 7.86 (1H, s), 7.91 (1H, d, J=8.2Hz), 8.57 (1H, d, J=1.3Hz), 8.77 (1H, d, J=9.0Hz).

MS m/z: 336(M⁺), 320, 303, 288, 261, 235, 202, 162, 134, 101.

実施例 1 9 5

3, 3, 4 - トリメチル - 8 b - キノリン - 3 - イル - 4, 8 b - ジヒドロ - 3 H - オキサジレノ [3, 2 - a] イソキノリン (化合物番号 3 - 5 6 番)

物性: 油状物。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm: 0.99 (3H, s), 1.42 (3H, d, J=7.1Hz), 1.61 (3H, s), 3.00 (1H, q, J=7.1Hz), 7.01 (1H, d, J=7.7Hz), 7.13 (1H, t, J=7.7Hz), 7.38-7.41 (2H, m), 7.58 (1H, t, J=8.2Hz), 7.75 (1H, t, J=8.2Hz), 7.86 (1H, d, J=8.2Hz), 8.17 (1H, d, J=8.2Hz), 8.28 (1H, s), 8.95 (1H, s).

MS m/z: 316(M⁺), 299, 285, 271, 257, 243.

実施例 1 9 6

3, 3, 4, 4 - テトラメチル - 8 b - キノリン - 3 - イル - 4, 8 b - ジヒドロ - 3 H - オキサジレノ [3, 2 - a] イソキノリン (化合物番号 3 - 9 1 番)

物性: 油状物。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm: 1.25 (3H, s), 1.44 (3H, s), 1.45 (3H, s), 1.49 (3H, s), 7.06 (1H, d, J=7.4Hz), 7.14 (1H, t, J=7.4Hz), 7.42 (1H, t, J=7.4Hz), 7.50 (1H, d, J=7.4Hz), 7.59 (1H, t, J=7.6Hz), 7.76 (1H, t, J=7.6Hz), 7.85 (1H, d, J=7.6Hz), 8.16 (1H, d, J=7.6Hz), 8.28 (1H, s), 8.93 (1H, s).

MS m/z: 330(M⁺), 313, 299, 273, 257, 242.

実施例 197

5-フルオロ-3, 3-ジメチル-8b-キノリン-3-イル-4, 8b-ジヒドロ-3H-オキサジレノ[3, 2-a]イソキノリン (化合物番号 3-20番)

5 物性: アモルファス。

¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm: 1.19 (3H, s), 1.59 (3H, s), 2.62 (1H, d, J=16.1Hz), 2.95 (1H, d, J=16.1Hz), 6.84 (1H, d, J=6.5Hz), 7.06-7.16 (2H, m), 7.60 (1H, t, J=7.5Hz), 7.78 (1H, t, J=10.5Hz), 7.87 (1H, d, J=8.2Hz), 8.17 (1H, d, J=8.5Hz), 8.28 (1H, d, J=2.1Hz), 8.95 (1H, d, J=2.1Hz).

10 MS m/z: 320(M⁺), 303, 289, 261, 248, 254, 238, 201, 84.

実施例 198

5-フルオロ-3, 3, 4, 4-テトラメチル-8b-(1-オキシドキノリン-3-イル)-4, 8b-ジヒドロ-3H-オキサジレノ[3, 2-a]イソキノリン (化合物番号 3-108番)

15 物性: 融点173-175°C。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm: 1.29 (6H, s), 1.43 (6H, d, J=3.2Hz), 7.04 (1H, d, J=6.7Hz), 7.12-7.27 (2H, m), 7.68 (1H, t, J=7.5Hz), 7.80 (1H, t, J=7.4Hz), 7.90 (2H, d, J=8.2Hz), 8.77 (2H, d, J=9.8Hz).

MS m/z: 354(M⁺), 348, 331, 307, 275, 260, 229, 214, 164, 146, 101.

20 実施例 199

6-フルオロ-3, 3, 4, 4-テトラメチル-8b-キノリン-3-イル-4, 8b-ジヒドロ-3H-オキサジレノ[3, 2-a]イソキノリン (化合物番号 3-110番)

物性: 油状物。

25 ¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm: 1.24 (3H, s), 1.41 (3H, s), 1.44 (3H, s), 1.49 (3H, s), 6.82 (1H, dt, J=2.2, 8.8Hz), 7.04 (1H, dd, J=6.0, 8.8Hz), 7.19 (1H, dd, J=2.2, 10.4Hz), 7.59 (1H, t, J=8.2Hz), 7.76 (1H, t, J=8.2Hz), 7.85 (1H, d, J=8.2Hz), 8.15 (1H, d, J=8.2Hz), 8.26 (1H, s), 8.90 (1H, s).

MS m/z: 348(M⁺), 331, 317, 291, 275, 260.

実施例 200

6-クロロ-3, 3, 4, 4-テトラメチル-8b-キノリン-3-イル-
4, 8b-ジヒドロ-3H-オキサジレノ[3, 2-a]イソキノリン (化合物
番号 3-113 番)

物性: 油状物。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm: 1.24 (3H, s), 1.42 (3H, s), 1.45 (3H, s),
1.49 (3H, s), 7.01 (1H, d, J=8.2Hz), 7.12 (1H, d, J=8.2Hz), 7.47 (1H, s),
7.60 (1H, t, J=7.6Hz), 7.77 (1H, t, J=7.6Hz), 7.86 (1H, d, J=7.6Hz),
8.16 (1H, d, J=7.6Hz), 8.26 (1H, s), 8.90 (1H, s).

MS m/z: 364(M⁺), 347, 291, 256.

実施例 201

7-メチル-3, 3, 4, 4-テトラメチル-8b-キノリン-3-イル-
4, 8b-ジヒドロ-3H-オキサジレノ[3, 2-a]イソキノリン (化合物
番号 3-118 番)

物性: 油状物。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm: 1.25 (3H, s), 1.42 (3H, s), 1.43 (3H, s),
1.48 (3H, s), 2.19 (3H, s), 6.84 (1H, s), 7.24 (1H, d, J=8.2Hz), 7.39
(1H, d, J=8.2Hz), 7.60 (1H, t, J=7.6Hz), 7.77 (1H, t, J=7.6Hz), 7.87 (1H,
d, J=7.6Hz), 8.17 (1H, d, J=7.6Hz), 8.28 (1H, s), 8.93 (1H, s).

MS m/z: 344(M⁺), 327, 313, 288, 271, 256.

実施例 202

4', 4'-ジメチル-8b'-キノリン-3-イル-4', 8b'-ジヒドロスピ
ロ[シクロペンタン-1, 3'-オキサジレノ[3, 2-a]イソキノリン] (化
合物番号 3-126 番)

物性: 油状物。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm: 1.25-1.67 (14H, m), 7.05-7.59 (4H, m),
7.59-7.61 (1H, m), 7.76 (1H, t, J=7.7Hz), 7.85-7.87 (1H, m), 8.17 (1H, d,
J=8.2Hz), 8.29 (1H, s), 8.96 (1H, s).

MS m/z : 356 (M^+), 339, 301, 287, 271, 257, 213.

実施例 203

4, 4, 5-トリフルオロ-3, 3-ジメチル-8b-キノリン-3-イル-
4, 8b-ジヒドロ-3H-オキサジレノ[3, 2-a]イソキノリン (化合物
番号 3-135 番)

物性: 油状物。

$^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.41 (3H, d, $J=2.7\text{Hz}$), 1.73 (3H, d, $J=2.2\text{Hz}$), 6.96 (1H, d, $J=8.7\text{Hz}$), 7.29 (1H, t, $J=8.7\text{Hz}$), 7.37-7.40 (1H, m), 7.64 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 7.81 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 7.89 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.19 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.29 (1H, d, $J=2.2\text{Hz}$), 8.94 (1H, d, $J=2.2\text{Hz}$).

MS m/z : 356 (M^+), 339, 319, 283.

実施例 204

3-(5-フルオロ-3, 3, 4, 4-テトラメチル-2-オキシド-
3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン (化合物番号 4-
100 番) (I 工程)

5-フルオロ-3, 3, 4, 4-テトラメチル-8b-キノリン-3-イル-
4, 8b-ジヒドロ-3H-オキサジレノ[3, 2-a]イソキノリン (6.8 g,
19.5 ミリモル) のクロロホルム (60 mL) 溶液に、メタンスルホン酸 (3.5 mL)
を加え、室温で 4 時間攪拌した後、炭酸水素ナトリウム水溶液を加え、酢酸エチ
ルで抽出し、水洗、濃縮して得られた残渣をクロマトグラフィーに付し、目的物
5.7 g (収率 84%) を得た。

物性: 融点 165-168°C。

$^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.56 (12H, s), 6.65 (1H, dd, $J=7.5, 1.5\text{Hz}$),
6.98-7.16 (2H, m), 7.57 (1H, t, $J=7.5\text{Hz}$), 7.73-7.88 (2H, m), 8.14 (1H, d,
 $J=8.5\text{Hz}$), 8.40 (1H, s), 8.92 (1H, s).

MS m/z : 348 (M^+), 331, 317, 291, 275, 260, 234, 177, 128, 101, 83.

実施例 204 と同様にして、以下の化合物を合成した。

実施例 205

3-(5-フルオロ-3, 3-ジメチル-2-オキシド-3, 4-ジヒドロイ

ソキノリン-1-イル)キノリン 1-オキシド (化合物番号4-38番)

物性: 融点130-135°C。

¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm: 1.20 (3H, s), 1.34 (3H, s), 2.04 (2H, s),
7.25-7.55 (5H, m), 7.69 (1H, d, J=7.7Hz), 7.95 (1H, d, J=7.4Hz), 8.02
5 (1H, d, J=7.4Hz), 8.61 (1H, s).

MS m/z: 336(M⁺), 321, 204, 177, 160, 149, 133, 109, 89.

実施例206

3-(3,3,4-トリメチル-2-オキシド-3,4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン (化合物番号4-65番)

10 物性: 油状物。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm: 1.38 (3H, d, J=7.2Hz), 1.52 (3H, s), 1.54
(3H, s), 3.08 (1H, q, J=7.2Hz), 6.88 (1H, d, J=7.4Hz), 7.16 (1H, t,
J=7.4Hz), 7.28-7.34 (2H, m), 7.57 (1H, t, J=7.6Hz), 7.77 (1H, t,
J=7.6Hz), 7.85 (1H, d, J=7.6Hz), 8.15 (1H, d, J=7.6Hz), 8.52 (1H, s),
15 9.02 (1H, s).

MS m/z: 316(M⁺), 299, 257, 243, 256.

実施例207

3-(3,3,4,4-テトラメチル-2-オキシド-3,4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン (化合物番号4-91番)

20 物性: 油状物。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm: 1.38-1.75 (12H, m), 6.88 (1H, d, J=7.7Hz),
7.16 (1H, t, J=7.7Hz), 7.36 (1H, t, J=7.7Hz), 7.45 (1H, d, J=7.7Hz),
7.58 (1H, t, J=7.7Hz), 7.77 (1H, t, J=7.7Hz), 7.85 (1H, d, J=7.7Hz),
8.16 (1H, d, J=7.7Hz), 8.49 (1H, s), 9.00 (1H, s).

25 MS m/z: 330(M⁺), 313, 271, 257, 242.

実施例208

3-(5-フルオロ-3,3-ジメチル-2-オキシド-3,4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン (化合物番号4-20番)

物性: 油状物。

¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm: 1.59 (6H, d, J=2.4Hz), 3.26 (2H, s), 6.68 (1H, d, J=7.7Hz), 7.02-7.19 (2H, m), 7.58 (1H, t, J=7.5Hz), 7.78 (1H, t, J=7.1Hz), 7.84 (1H, d, J=7.9Hz), 8.15 (1H, d, J=8.7Hz), 8.48 (1H, d, J=1.8Hz), 8.97 (1H, d, J=2.1Hz).

5 MS m/z: 320(M⁺), 303, 288, 261, 248, 173, 156, 128, 101, 84.

実施例 2 0 9

3 - (6 - フルオロ - 3, 3, 4, 4 - テトラメチル - 2 - オキシド - 3, 4 - ジヒドロイソキノリン - 1 - イル) キノリン (化合物番号 4 - 1 0 9 番)

10 物性: 油状物。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm: 1.42-1.80 (12H, m), 6.85-6.88 (2H, m), 7.16 (1H, dd, J=1.6, 9.9Hz), 7.58 (1H, t, J=7.6Hz), 7.78 (1H, t, J=7.6Hz), 7.85 (1H, d, J=7.6Hz), 8.15 (1H, d, J=7.6Hz), 8.48 (1H, s), 8.98 (1H, s).
MS m/z: 348(M⁺), 331, 317, 289, 275, 260.

15 実施例 2 1 0

3 - (7 - フルオロ - 3, 3, 4, 4 - テトラメチル - 2 - オキシド - 3, 4 - ジヒドロイソキノリン - 1 - イル) キノリン (化合物番号 4 - 1 1 0 番)

物性: 油状物。

20 ¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm: 1.43-1.60 (12H, m), 6.59 (1H, dd, J=2.7, 9.3Hz), 7.04 (1H, dt, J=2.7, 8.2Hz), 7.40 (1H, dd, J=5.5, 8.2Hz), 7.59 (1H, t, J=7.6Hz), 7.79 (1H, t, J=7.6Hz), 7.86 (1H, d, J=7.6Hz), 8.17 (1H, d, J=7.6Hz), 8.44 (1H, s), 8.98 (1H, s).
MS m/z: 348(M⁺), 331, 275, 260.

25 実施例 2 1 1

3 - (6 - クロロ - 3, 3, 4, 4 - テトラメチル - 2 - オキシド - 3, 4 - ジヒドロイソキノリン - 1 - イル) キノリン (化合物番号 4 - 1 1 3 番)

物性: 油状物。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm: 1.43-1.45 (12H, m), 6.83 (1H, d, J=8.2Hz),

7.14 (1H, dd, $J=2.2, 8.2\text{Hz}$), 7.41 (1H, d, $J=2.2\text{Hz}$), 7.58 (1H, t, $J=8.0\text{Hz}$), 7.78 (1H, t, $J=8.0\text{Hz}$), 7.85 (1H, d, $J=8.0\text{Hz}$), 8.16 (1H, d, $J=8.0\text{Hz}$), 8.46 (1H, s), 8.97 (1H, s).

MS m/z : 364(M^+), 347, 291, 256.

5 実施例 2 1 2

3- (7-クロロ-3, 3, 4, 4-テトラメチル-2-オキシド-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン (化合物番号 4-114 番)

物性: 油状物。

10 $^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.44-1.65 (12H, m), 6.86 (1H, d, $J=1.6\text{Hz}$), 7.33 (1H, dd, $J=1.6, 8.2\text{Hz}$), 7.38 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 7.61 (1H, t, $J=8.0\text{Hz}$), 7.81 (1H, t, $J=8.0\text{Hz}$), 7.88 (1H, d, $J=8.0\text{Hz}$), 8.18 (1H, d, $J=8.0\text{Hz}$), 8.46 (1H, s), 8.97 (1H, s).

MS m/z : 364(M^+), 347, 291, 256.

実施例 2 1 3

15 3- (6-メチル-3, 3, 4, 4-テトラメチル-2-オキシド-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン (化合物番号 4-117 番)

物性: 油状物。

20 $^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.43-1.76 (12H, m), 2.39 (3H, s), 6.77 (1H, d, $J=7.8\text{Hz}$), 6.97 (1H, d, $J=7.8\text{Hz}$), 7.24 (1H, s), 7.57 (1H, t, $J=7.6\text{Hz}$), 7.76 (1H, t, $J=7.6\text{Hz}$), 7.84 (1H, d, $J=7.6\text{Hz}$), 8.15 (1H, d, $J=7.6\text{Hz}$), 8.50 (1H, s), 9.00 (1H, s).

MS m/z : 344(M^+), 327, 313, 285, 271, 256.

実施例 2 1 4

25 3- (7-メチル-3, 3, 4, 4-テトラメチル-2-オキシド-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン (化合物番号 4-118 番)

物性: 油状物。

$^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.36-1.52 (12H, m), 2.20 (3H, s), 6.67 (1H, s), 7.17 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 7.32 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 7.59 (1H, t, $J=7.6\text{Hz}$), 7.78 (1H, t, $J=7.6\text{Hz}$), 7.86 (1H, d, $J=7.6\text{Hz}$), 8.16 (1H, d, $J=7.6\text{Hz}$),

8.50 (1H, s), 8.98 (1H, s).

MS m/z: 344(M⁺), 327, 313, 271, 256.

実施例 2 1 5

3', 3'-ジメチル-1'-(1-オキシド-キノリン-3-イル)-3'-H-ス
5 ピロ[シクロペンタン-1, 4'-イソキノリン] 2'-オキシド (化合物番号
4-126番)

物性: 油状物。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm: 0.79 (3H, s), 1.18 (3H, d, J=6.6Hz), 1.24-
1.91 (6H, m), 2.43-2.48 (1H, m), 2.85-2.90 (1H, m), 7.08 (1H, d,
10 J=7.7Hz), 7.16 (1H, t, J=7.7Hz), 7.31 (1H, d, J=7.7Hz), 7.42 (1H, t,
J=7.7Hz), 7.70 (1H, t, J=8.2Hz), 7.82 (1H, t, J=8.2Hz), 7.87 (1H, s),
7.93 (1H, d, J=8.2Hz), 8.58 (1H, s), 8.79 (1H, d, J=8.2Hz).

MS m/z: 372(M⁺), 356, 339, 287, 269, 257.

実施例 2 1 6

15 4', 4'-ジメチル-1'-キノリン-3-イル-4'-H-スピロ[シクロペンタン
-1, 4'-イソキノリン] 2'-オキシド (化合物番号4-127番)

物性: 油状物。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm: 1.24-2.04 (14H, m), 6.86 (1H, d, J=7.6Hz),
7.14 (1H, t, J=7.6Hz), 7.36 (1H, t, J=7.6Hz), 7.43 (1H, d, J=7.6Hz),
20 7.58 (1H, t, J=7.6Hz), 7.77 (1H, t, J=7.6Hz), 7.85 (1H, d, J=7.6Hz),
8.16 (1H, d, J=7.6Hz), 8.48 (1H, s), 8.99 (1H, s).

MS m/z: 356(M⁺), 339, 301, 283, 257.

実施例 2 1 7

25 4', 4'-ジメチル-1'-キノリン-3-イル-4'-H-スピロ[シクロヘキサン
-1, 4'-イソキノリン] 2'-オキシド (化合物番号4-126番)

物性: 油状物。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm: 1.30 (3H, s), 1.42-1.90 (8H, m), 1.58 (3H,
s), 2.37-2.40 (1H, m), 2.47-2.50 (1H, m), 6.87 (1H, d, J=7.8Hz), 7.14
(1H, t, J=7.8Hz), 7.33 (1H, t, J=7.8 Hz), 7.41 (1H, d, J=8.2Hz), 7.57

(1H, t, $J=7.8\text{Hz}$), 7.76 (1H, t, $J=7.8\text{Hz}$), 7.84 (1H, d, $J=7.8\text{Hz}$), 8.15 (1H, d, $J=7.8\text{Hz}$), 8.35 (1H, s), 8.99 (1H, s).

MS m/z : 370(M^+), 353, 285, 257, 242.

実施例 2 1 8

5 3- (4, 4-ジフルオロ-3, 3-ジメチル-2-オキシド-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン (化合物番号 4-218 番)

物性: 油状物。

$^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.68 (6H, s), 7.03 (1H, d, $J=7.7\text{Hz}$), 7.40-7.63 (3H, m), 7.78-7.88 (3H, m), 8.17 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.47 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$), 9.00 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$).

10 MS m/z : 338(M^+), 321, 301, 294, 265, 246, 128, 119, 101, 84.

実施例 2 1 9

15 3- (4, 4, 5-トリフルオロ-3, 3-ジメチル-2-オキシド-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン (化合物番号 4-219 番)

物性: 油状物。

$^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.72 (6H, s), 6.80 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 7.19 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 7.37-7.42 (1H, m), 7.61 (1H, t, $J=7.6\text{Hz}$), 7.81 (1H, t, $J=7.6\text{Hz}$), 7.86 (1H, d, $J=7.6\text{Hz}$), 8.17 (1H, d, $J=7.6\text{Hz}$), 8.40 (1H, s), 8.94 (1H, s).

20 MS m/z : 356(M^+), 339, 319, 283.

実施例 2 2 0

25 3- (4, 4, 6-トリフルオロ-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン (化合物番号 1-940 番)

物性: 油状物。

$^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.46 (6H, s), 7.16-7.17 (1H, m), 7.33-7.40 (1H, m), 7.57 (1H, d, $J=8.5\text{Hz}$), 7.62 (1H, t, $J=6.9\text{Hz}$), 7.80 (1H, t, $J=6.9\text{Hz}$), 7.89 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.18 (1H, d, $J=8.5\text{Hz}$), 8.37 (1H, d, $J=1.8\text{Hz}$), 9.12 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$).

MS m/z: 340(M⁺), 325, 305, 284, 248, 170, 128, 101.

実施例 2 2 1

3 - (4, 4, 7 - トリフルオロー 3, 3 - ジメチルー 3, 4 - ジヒドロイソキノリン - 1 - イル) キノリン (化合物番号 1 - 9 4 1 番)

5 物性: 油状物。

¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm: 1.46 (6H, s), 7.04 (1H, d, J=8.9Hz), 7.35 (1H, td, J=8.4Hz, 2.3Hz), 7.63 (1H, t, J=7.2Hz), 7.81 (1H, t, J=8.9Hz), 7.86-7.87 (1H, m), 7.90 (1H, d, J=8.2Hz), 8.19 (1H, d, J=8.9Hz), 8.38 (1H, d, J=1.4Hz), 9.14 (1H, d, J=2.7Hz).

10 MS m/z: 340(M⁺), 325, 305, 284, 248, 160, 149, 128, 101.

実施例 2 2 2

3 - (6 - クロロー 4, 4 - ジフルオロー 3, 3 - ジメチルー 3, 4 - ジヒドロイソキノリン - 1 - イル) キノリン (化合物番号 1 - 9 4 3 番)

物性: 油状物。

15 ¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm: 1.46 (6H, s), 7.30 (1H, d, J=8.2Hz), 7.52 (1H, d, J=6.9Hz), 7.63 (1H, t, J=7.6Hz), 7.81 (1H, t, J=7.6Hz), 7.86 (1H, s), 7.89 (1H, d, J=8.2Hz), 8.19 (1H, d, J=8.2Hz), 8.37 (1H, d, J=2.1Hz), 9.12 (1H, d, J=2.1Hz).

MS m/z: 356(M⁺), 321, 300, 265, 149, 101.

20 実施例 2 2 3

3 - (7 - クロロー 4, 4 - ジフルオロー 3, 3 - ジメチルー 3, 4 - ジヒドロイソキノリン - 1 - イル) キノリン (化合物番号 1 - 9 4 4 番)

物性: 油状物。

25 ¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm: 1.45 (6H, s), 7.31 (1H, s), 7.58-7.67 (2H, m), 7.80 (2H, t, J=8.2Hz), 7.91 (1H, d, J=7.7Hz), 8.19 (1H, d, J=8.5Hz), 8.38 (1H, s), 9.12 (1H, s).

MS m/z: 356(M⁺), 341, 321, 300, 265, 168, 119, 101.

実施例 2 2 4

3 - (6 - プロモー 4, 4 - ジフルオロー 3, 3 - ジメチルー 3, 4 - ジヒド

ロイソキノリン-1-イル) キノリン (化合物番号 1-946 番)

物性: 油状物。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm: 1.46 (6H, s), 7.28-7.70 (1H, m), 7.61 (1H, t, J=7.4Hz), 7.67 (1H, d, J=8.2Hz), 7.80 (1H, t, J=7.7Hz), 7.89 (1H, d, J=8.2Hz), 8.00 (1H, s), 8.19 (1H, d, J=8.8Hz), 8.19 (1H, s), 9.13 (1H, d, J=2.2Hz).

MS m/z: 400(M⁺), 385, 353, 321, 297, 265.

実施例 2 2 5

3-(7-ブromo-4, 4-ジフルオロ-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン (化合物番号 1-947 番)

物性: 融点 123-125°C。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm: 1.45 (6H, s), 7.47 (1H, s), 7.63 (1H, t, J=7.7Hz), 7.75 (1H, d, J=8.2Hz), 7.78-7.83 (2H, m), 7.92 (1H, d, J=7.7Hz), 8.20 (1H, d, J=8.2Hz), 8.39 (1H, d, J=2.2Hz), 9.13 (1H, d, J=2.2Hz).

MS m/z: 400(M⁺), 385, 265, 346, 321, 265, 245, 149, 119, 101.

実施例 2 2 6

3-(6-メチル-4, 4-ジフルオロ-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン (化合物番号 1-949 番)

物性: 油状物。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm: 1.45 (6H, s), 2.50 (3H, s), 7.21 (1H, d, J=8.2Hz), 7.33 (1H, d, J=7.7Hz), 7.61 (1H, t, J=7.7Hz), 7.68 (1H, s), 7.79 (1H, t, J=7.7Hz), 7.89 (1H, d, J=7.7Hz), 8.18 (1H, d, J=8.2Hz), 8.39 (1H, s), 9.13 (1H, d, J=1.6Hz).

MS m/z: 336(M⁺), 335, 321, 301, 280, 265, 239, 158, 101.

実施例 2 2 7

3-(4, 4-ジフルオロ-6-メトキシ-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン (化合物番号 1-950 番)

物性: 油状物。

$^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.45 (6H s), 3.93 (3H, s), 6.98 (1H, dd, $J=8.6, 2.4\text{Hz}$), 7.24-7.27 (1H, m), 7.37 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$), 7.61 (1H, t, $J=6.9\text{Hz}$), 7.78 (1H, t, $J=7.6\text{Hz}$), 7.88 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.17 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.38 (1H, d, $J=1.4\text{Hz}$), 9.12 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$).

5 MS m/z : 352 (M^+), 337, 321, 296, 265, 196, 167, 149, 101, 88, 59.

実施例 2 2 8

3 - (5, 7 - ジクロロ - 4, 4 - ジフルオロ - 3, 3 - ジメチル - 3, 4 - ジヒドロイソキノリン - 1 - イル) キノリン (化合物番号 1 - 9 5 1 番)

物性: 油状物。

10 $^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.49 (6H, s), 7.21 (1H, d, $J=1.4\text{Hz}$), 7.63 (1H, d, $J=7.6\text{Hz}$), 7.66 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$), 7.82 (1H, t, $J=7.9\text{Hz}$), 7.91 (1H, d, $J=7.6\text{Hz}$), 8.19 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.32 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$), 9.05 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$).

MS m/z : 390 (M^+), 355, 334, 299, 178, 149, 126, 101, 72.

15 実施例 2 2 9

3 - (4, 4, 6 - トリフルオロ - 3, 3, 7 - トリメチル - 3, 4 - ジヒドロイソキノリン - 1 - イル) キノリン (化合物番号 1 - 9 5 2 番)

物性: 油状物。

20 $^1\text{H-NMR}$ (500MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.44 (6H, s), 2.27 (3H, s), 7.16 (1H, d, $J=7.6\text{Hz}$), 7.50 (1H, d, $J=7.6\text{Hz}$), 7.63 (1H, t, $J=7.6\text{Hz}$), 7.81 (1H, td, $J=7.9, 1.6\text{Hz}$), 7.91 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.19 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.39 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$), 9.10 (1H, $J=2.1\text{Hz}$).

MS m/z : 353 (M^+-1), 339, 298, 149, 126, 118, 100.

実施例 2 3 0

25 3 - (6 - フルオロ - 4 - ケト - 3, 3 - ジメチル - 3, 4 - ジヒドロイソキノリン - 1 - イル) キノリン (化合物番号 1 - 9 5 3 番)

物性: 油状物。

$^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.62 (6H, s), 7.33-7.48 (3H, m), 7.64 (1H, t, $J=8.1\text{Hz}$), 7.78-7.87 (2H, m), 7.91 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.20 (1H, d,

$J=8.7\text{Hz}$), 8.36 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$), 9.09 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$).

MS m/z : 318(M^+), 303, 289, 275, 262, 248, 234, 207, 159, 128, 117, 104.

実施例 2 3 1

5 3-(7-フルオロ-4-ケト-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン (化合物番号 1-954 番)

物性: 油状物。

$^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.46 (6H, s), 7.04 (1H, d, $J=8.9\text{Hz}$), 7.35 (1H, td, $J=8.4\text{Hz}$, 2.3Hz), 7.63 (1H, br. t, $J=7.2\text{Hz}$), 7.81 (1H, br. t, $J=8.9\text{Hz}$), 7.86-7.87 (1H, m), 7.90 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$), 8.19 (1H, d, $J=8.9\text{Hz}$), 8.38 (1H, d, $J=1.4\text{Hz}$), 9.14 (1H, d, $J=2.7\text{Hz}$).

MS m/z : 340(M^+), 325, 305, 284, 248, 160, 149, 128, 101.

実施例 2 3 2

15 3-(5-クロロ-4-ケト-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン (化合物番号 1-955 番)

物性: 油状物。

$^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.60 (6H, s), 7.27 (1H, d, $J=6.9\text{Hz}$), 7.52-7.70 (3H, m), 7.80 (1H, t, $J=8.2\text{Hz}$), 7.90 (1H, d, $J=7.9\text{Hz}$), 8.19 (1H, d, $J=7.9\text{Hz}$), 8.35 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$), 9.07 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$).

MS m/z : 334(M^+), 319, 305, 291, 271, 250, 214, 187, 128, 101.

20 実施例 2 3 3

3-(7-クロロ-4-ケト-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン (化合物番号 1-957 番)

物性: 油状物。

25 $^1\text{H-NMR}$ (270MHz, CDCl_3) δ ppm: 1.61 (6H, s), 7.37 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$), 7.62-7.68 (2H, m), 7.82 (1H, t, $J=8.7\text{Hz}$), 7.93 (1H, d, $J=8.1\text{Hz}$), 8.13 (1H, d, $J=8.5\text{Hz}$), 8.21 (1H, d, $J=8.7\text{Hz}$), 8.37 (1H, d, $J=2.1\text{Hz}$), 9.09 (1H, d, $J=2.4\text{Hz}$).

MS m/z : 334(M^+), 319, 305, 291, 271, 250, 214, 187, 128, 101.

実施例 2 3 4

3- (5-プロモ-4-ケト-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン (化合物番号1-958番)

物性: 油状物。

¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm: 1.60 (6H, s), 7.31 (1H, dd, J=7.9, 1.1Hz),
5 7.47 (1H, t, J=7.9Hz), 7.63 (1H, t, J=8.2Hz), 7.80 (1H, t, J=8.5Hz),
7.87-7.93 (2H, m), 8.18 (1H, d, J=8.2Hz), 8.35 (1H, d, J=1.6Hz), 9.07
(1H, d, J=2.1Hz).

実施例 2 3 5

3- (6-プロモ-4-ケト-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノ
10 リン-1-イル) キノリン (化合物番号1-959番)

物性: 油状物。

¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm: 1.61 (6H, s), 7.29 (1H, d, J=8.2Hz), 7.55-
7.67 (1H, m), 7.75-7.88 (2H, m), 7.90 (1H, d, J=9.0Hz), 8.19 (1H, d,
8.5Hz), 8.19 (1H, d, J=1.8Hz), 8.35 (1H, d, J=1.8Hz), 9.08 (1H, d,
15 J=1.6Hz).

MS m/z: 378(M⁺), 365, 349, 337, 294, 285, 271, 229, 214, 128, 101.

実施例 2 3 6

3- (7-プロモ-4-ケト-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノ
20 リン-1-イル) キノリン (化合物番号1-960番)

物性: 油状物。

¹H-NMR (500MHz, CDCl₃) δ ppm: 1.61 (6H, s), 7.54 (1H, d, J=1.6Hz), 7.65
(1H, t, J=7.4Hz), 7.80-7.89 (2H, m), 7.94 (1H, d, J=7.7Hz), 8.04 (1H, d,
J=8.2Hz), 8.21 (1H, d, J=8.8Hz), 8.37 (1H, d, J=2.2Hz), 9.09 (1H, d,
J=2.2Hz).

25 MS m/z: 378(M⁺), 363, 351, 337, 322, 296, 271, 255, 229, 214, 187, 167,
149, 128, 107, 75, 57.

実施例 2 3 7

4, 4-ジフルオロ-3, 3-ジメチル-8b-キノリン-3-イル-
4, 8b-ジヒドロ-3H-オキサジレノ[3, 2-a]イソキノリン (化合物

番号 3-134 番)

物性：油状物。

¹H-NMR (270MHz, CDCl₃) δ ppm: 1.32 (3H, d, J=2.6Hz), 1.73 (3H, d, J=2.4Hz), 7.16 (1H, d, J=7.7Hz), 7.42 (1H, t, J=7.7Hz), 7.56-7.66 (2H, m), 7.76-7.83 (1H, m), 7.87-7.93 (2H, m), 8.18 (1H, d, J=9.0Hz), 8.31 (1H, d, J=2.1Hz), 8.94 (1H, d, J=2.1Hz).

MS m/z: 338(M⁺), 322, 301, 287, 266, 230, 154, 128, 101, 85.

製剤例 1

粉剤

実施例 1 の化合物 (1.0 質量部)、ドリレス A (アルキルエーテルリン酸エステル、日本化薬株式会社製、0.4 質量部)、カープレックス #80-D (ホワイトカーボン、塩野義製薬株式会社製、1.5 質量部)、炭酸カルシウム (足立石灰株式会社製、0.5 質量部) 及び啓和クレー風ヒ (啓和炉材株式会社製、32.1 質量部) を混合後、エックサンプル K I I - 1 型 (ハンマーミル)、不二パウダル株式会社製) で粉砕し、得られた粉砕物の質量に対して 1.5 倍量の DL クレー啓和 (啓和炉材株式会社製) を加え混合し、粉剤 DL を得た。

製剤例 2

乳剤

実施例 2 の化合物 (10 質量部) をキシレン (和光純薬株式会社製、40 質量部) と DMSO (和光純薬株式会社製、35 質量部) の混合溶液に溶解し、この溶液に Parakol KPS (アニオン界面活性剤とノニオン界面活性剤の混合物、日本乳化剤株式会社製、25 質量部) を添加混合し、乳剤を得た。

製剤例 3

水和剤

実施例 3 の化合物 (1 質量部)、カープレックス #80-D (10 質量部)、ゴーセノール GL05 (ポリビニルアルコール、日本合成化学株式会社製、2 質量部)、ニューコール 291 PG (ジオクチルスルホコハク酸ナトリウム塩、日本乳化剤株式会社製、0.5 質量部)、ネオゲンパウダー (直鎖アルキルベンゼ

ンスルホン酸ナトリウム塩)、第一工業製薬株式会社製、5質量部)、ラジオライト#200(焼成珪藻土)、昭和化学工業株式会社製、10質量部)及びH微分(カオリナイトクレー)、啓和炉材株式会社製、71.5質量部)を十分に混合し、エックサンプルKII-1型で粉碎し、水和剤を得た。

5 製剤例4

粒剤

実施例4の化合物(2質量部)、トリポリリン酸ナトリウム(三井化学株式会社製、2質量部)、アミコールNO.1(デキストリン、日本澱粉化学株式会社製、1.5質量部)、ベントナイト(豊順鉱業株式会社製、25質量部)及びカルヒン600(炭酸カルシウム、足立石灰株式会社製、69.5質量部)を混合し、ドームグラン(不二パウダル株式会社製、スクリーン0.9mmφ)を用いて押し出し造粒した。得られた造粒物を棚型乾燥機(タバイ株式会社製、PERFECT OVEN PS-222型、60℃)にて乾燥した後、600~1180μmに篩分して、粒剤を得た。

15

試験例1

イネいもち病防除試験(治療効果)

第3~4葉期のポット栽培供試植物(イネ:幸風)に病原菌孢子懸濁液を噴霧接種し、室温が20~23℃の接種室に当該ポットを入れ発病を促した。本発明化合物をジメチルスルホキシド-メタノール混合溶液(容積比:7/3)に溶解せしめ、本発明化合物を300ppm含有する散布液を調整し、当該ポットに均一に散布した。接種7日後の発病程度を調査した。試験は2連で行った。

20

なお、発病程度は、試験植物の発病程度を肉眼観察し、下記の基準で判定し、0~3の4段階で表した。

25

発病程度が0:発病が全く無い。

1:発病程度が無処理区の40%未満である。

2:発病程度が40%以上80%未満である。

3:発病程度が80%以上である。

本試験の結果、実施例2(化合物番号1-32)、実施例4(化合物番号2-

1)、实施例6 (化合物番号1-1)、实施例7 (化合物番号1-7)、实施例
9 (化合物番号1-19)、实施例14 (化合物番号1-38)、实施例16 (化
合物番号1-41)、实施例18 (化合物番号1-44)、实施例21 (化合物番
号1-54)、实施例22 (化合物番号1-56)、实施例26 (化合物番号1-
5 69)、实施例30 (化合物番号1-85)、实施例32 (化合物番号1-94)、
实施例33 (化合物番号1-95)、实施例36 (化合物番号1-100)、实施
例38 (化合物番号1-101)、实施例39 (化合物番号1-101)、实施例
51 (化合物番号1-116)、实施例52 (化合物番号1-117)、实施例
55 (化合物番号1-137)、实施例56 (化合物番号1-147)、实施例
10 57 (化合物番号1-175)、实施例58 (化合物番号1-185)、实施例
59 (化合物番号1-213)、实施例60 (化合物番号1-251)、实施例
62 (化合物番号1-307)、实施例63 (化合物番号1-345)、实施例
66 (化合物番号1-385)、实施例68 (化合物番号1-387)、实施例
69 (化合物番号1-424)、实施例71 (化合物番号1-464)、实施例
15 72 (化合物番号1-502)、实施例73 (化合物番号1-540)、实施例
74 (化合物番号1-578)、实施例75 (化合物番号1-594)、实施例
79 (化合物番号1-672)、实施例80 (化合物番号1-710)、实施例
81 (化合物番号1-720)、实施例82 (化合物番号1-721)、实施例
101 (化合物番号1-790)、实施例103 (化合物番号1-793)、实施
20 例104 (化合物番号1-796)、实施例105 (化合物番号1-799)、实
施例106 (化合物番号1-802)、实施例107 (化合物番号1-804)、
实施例108 (化合物番号1-806)、实施例109 (化合物番号1-
807)、实施例110 (化合物番号2-36)、实施例112 (化合物番号2-
40)、实施例114 (化合物番号1-866番)、实施例117 (化合物番号
25 1-99)、实施例118 (化合物番号1-99)、实施例119 (化合物番号
1-856)、实施例124 (化合物番号2-255)、实施例125 (化合物番
号2-264)、实施例132 (化合物番号1-886)、实施例150 (化合物
番号1-904)、实施例156 (化合物番号1-910)、实施例158 (化
合物番号1-912)、实施例160 (化合物番号1-914)、实施例163 (化

合物番号 1-917)、実施例 164 (化合物番号 1-918)、実施例 165 (化合物番号 1-919)、実施例 171 (化合物番号 1-925)、実施例 174 (化合物番号 1-927)、実施例 177 (化合物番号 1-929)、実施例 178 (化合物番号 1-930)、実施例 181 (化合物番号 1-935)、
5 実施例 183 (化合物番号 1-937)、実施例 184 (化合物番号 1-938)、
実施例 185 (化合物番号 1-939)、実施例 193 (化合物番号 3-100)、実施例 196 (化合物番号 3-91)、実施例 197 (化合物番号 3-20)、実施例 198 (化合物番号 3-108)、実施例 199 (化合物番号 3-110)、実施例 202 (化合物番号 3-126)、実施例 203 (化合物番号 3-135)、
10 実施例 204 (化合物番号 4-100)、実施例 206 (化合物番号 4-65)、実施例 207 (化合物番号 4-91)、実施例 208 (化合物番号 4-20)、実施例 209 (化合物番号 4-109)、実施例 210 (化合物番号 4-110)、実施例 211 (化合物番号 4-113)、実施例 217 (化合物番号 4-129)、実施例 218 (化合物番号 4-134) 及び実施例 219 (化合物番号 4-135) の化合物は、発病程度が 0 であった。

試験例 2

トマト灰色かび病防除試験 (予防効果)

第 2~3 葉期のポット栽培供試植物 (トマト: 大型福寿) に、原体をジメチルスルホキサイドとメタノール (容積比 7:3) に溶解せしめ、本発明化合物を
20 300ppm 含有する散布液を均一に散布した。1 日栽培後、当該ポットに病原菌胞子懸濁液を噴霧接種し、室温が 20~23 度の接種室に当該ポットを入れ発病を促した。接種 2 日後の発病程度を調査した。試験は 2 連で行った。

なお、発病程度は、試験植物の発病程度を肉眼観察し、下記の基準で判定し、0~3 の 4 段階で表した。

25 発病程度が 0: 発病が全く無い。

1: 発病程度が無処理区の 40% 未満である。

2: 発病程度が 40% 以上 80% 未満である。

3: 発病程度が 80% 以上である。

本試験の結果、実施例 2 (化合物番号 1-32)、実施例 14 (化合物番号

1-38)、実施例18 (化合物番号1-44)、実施例20 (化合物番号1-53)、実施例21 (化合物番号1-54)、実施例22 (化合物番号1-56)、
5 実施例23 (化合物番号1-65)、実施例30 (化合物番号1-85)、実施例
44 (化合物番号1-106)、実施例51 (化合物番号1-116)、実施例
52 (化合物番号1-117)、実施例53 (化合物番号1-126)、実施例
56 (化合物番号1-147)、実施例58 (化合物番号1-185)、実施例
66 (化合物番号1-385)、実施例68 (化合物番号1-387)、実施例
69 (化合物番号1-424)、実施例71 (化合物番号1-464)、実施例
72 (化合物番号1-502)、実施例73 (化合物番号1-540)、実施例
10 75 (化合物番号1-594)、実施例79 (化合物番号1-672)、実施例
92 (化合物番号1-764)、実施例103 (化合物番号1-793)、実施例
107 (化合物番号1-804)、実施例108 (化合物番号1-806)、実施
例109 (化合物番号1-807)、実施例110 (化合物番号2-36)、実施
例112 (化合物番号2-40)、実施例114 (化合物番号1-866番)、実
15 施例120 (化合物番号1-857)、実施例121 (化合物番号1-858)、
実施例123 (化合物番号1-867)、実施例154 (化合物番号1-
908)、実施例156 (化合物番号1-910)、実施例158 (化合物番号
1-912)、実施例159 (化合物番号1-913)、実施例163 (化合物番
号1-917)、実施例164 (化合物番号1-918)、実施例165 (化合物
20 番号1-919)、実施例174 (化合物番号1-927)、実施例175 (化
合物番号1-926)、実施例177 (化合物番号1-929)、実施例178 (化
合物番号1-930)、実施例191 (化合物番号2-278)、実施例
193 (化合物番号3-100)、実施例196 (化合物番号3-91)、実施例
197 (化合物番号3-20)、実施例199 (化合物番号3-110)、実施例
25 202 (化合物番号3-126)、実施例203 (化合物番号3-135)、実施
例204 (化合物番号4-100)、実施例207 (化合物番号4-91)、実施
例209 (化合物番号4-109)、実施例211 (化合物番号4-113)、実施
例217 (化合物番号4-129)、実施例218 (化合物番号4-134)及び実
施例219 (化合物番号4-135)の化合物は、発病程度が0であった。

産業上の利用可能性

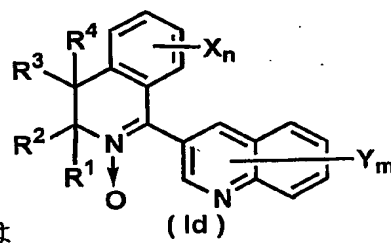
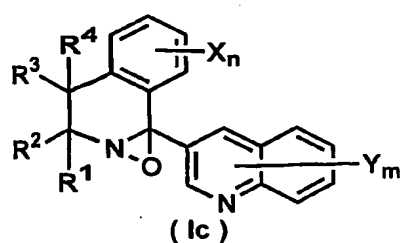
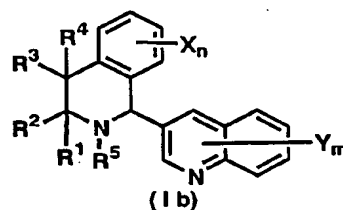
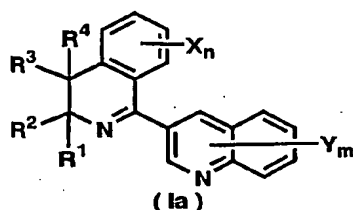
本発明化合物は、農園芸用殺菌剤として用いることができ、宿主植物に被害を与えることなく、種々の植物病原菌、特にイネいもち病に対して卓効を示すことから、農園芸用殺菌剤として優れたものである。

5

本発明化合物が優れた効力を発揮する植物病害としては、例えばイネいもち病 (*Pyricularia oryzae*) 並びにキュウリ、トマト及びインゲンの灰色かび病 (*Botrytis cinerea*) が挙げられるが、本発明化合物の殺菌スペクトラムは、これらに限定されない。

請求の範囲

1. 一般式 (I a)、(I b)、(I c) 又は (I d) :



、又は

(式中、

R^1 及び R^2 は、同一、若しくは異なってもよく、

ハロゲン原子、 $C_1 \sim C_6$ アルコキシ基、 $C_1 \sim C_6$ アルキルチオ基及びフェノキシ基からなる群から選ばれる同一若しくは異なった 1 ~ 3 個の置換基で置換されてよい $C_1 \sim C_6$ アルキル基；

ハロゲン原子、同一若しくは異なった 1 ~ 3 個のハロゲン原子で置換されてよい $C_1 \sim C_6$ アルキル基、 $C_1 \sim C_6$ アルコキシ基、同一若しくは異なった 1 ~ 2 個の $C_1 \sim C_6$ アルキル基又はアシル基で置換されてよいアミノ基、ニトロ基、シアノ基、水酸基、メルカプト基及び $C_1 \sim C_6$ アルキルチオ基からなる群から選ばれる同一若しくは異なった 1 ~ 6 個の置換基で置換されてよいアリール基；

ハロゲン原子、同一若しくは異なった 1 ~ 3 個のハロゲン原子で置換されてよい $C_1 \sim C_6$ アルキル基及び $C_1 \sim C_6$ アルコキシ基からなる群から選ばれる同一若しくは異なった 1 ~ 6 個の置換基で置換されてよいヘテロアリール基；

ハロゲン原子、同一若しくは異なった 1 ~ 3 個のハロゲン原子で置換されてよい $C_1 \sim C_6$ アルキル基、 $C_1 \sim C_6$ アルコキシ基、同一若しくは異なった 1 ~ 2 個

の $C_1 \sim C_6$ アルキル基又はアシル基で置換されてよいアミノ基、ニトロ基、シアノ基、水酸基、メルカプト基及び $C_1 \sim C_6$ アルキルチオ基からなる群から選ばれる同一若しくは異なった1～6個の置換基で置換されてよいアラルキル基であるか、又は、

- 5 R^1 と R^2 が一緒になって、ハロゲン原子、 $C_1 \sim C_6$ アルキル基、 $C_1 \sim C_6$ アルコキシ基及びフェノキシ基からなる群から選ばれる同一若しくは異なった1～3個の置換基で置換されてよい $C_3 \sim C_{10}$ シクロアルキル環を表し、

R^3 及び R^4 は、同一、若しくは異なってもよく、
水素原子；

- 10 ハロゲン原子、 $C_1 \sim C_6$ アルコキシ基、 $C_1 \sim C_6$ アルキルチオ基及びフェノキシ基からなる群から選ばれる同一若しくは異なった1～3個の置換基で置換されてよい $C_1 \sim C_6$ アルキル基；

ハロゲン原子；

$C_1 \sim C_6$ アルキレン基；

- 15 $C_1 \sim C_6$ アルコキシ基；

水酸基；若しくは

ケト基であるか、又は、

- 20 R^3 と R^4 が一緒になって、ハロゲン原子、 $C_1 \sim C_6$ アルキル基、 $C_1 \sim C_6$ アルコキシ基及びフェノキシ基からなる群から選ばれる同一若しくは異なった1～3個の置換基で置換されてよい $C_3 \sim C_{10}$ シクロアルキル環を表し；

R^5 は、

水素原子、アシル基；又は、

ハロゲン原子、 $C_1 \sim C_6$ アルコキシ基、 $C_1 \sim C_6$ アルキルチオ基及びフェノキシ基からなる群から選ばれる同一若しくは異なった1～3個の置換基で置換されてよい $C_1 \sim C_6$ アルキル基を示し、

25

Xは、ハロゲン原子；

ハロゲン原子、 $C_1 \sim C_6$ アルコキシ基、水酸基、 $C_1 \sim C_6$ アルコキシカルボニル基及びフェノキシ基からなる群から選ばれる同一若しくは異なった1～3個の置換基で置換されてよい $C_1 \sim C_6$ アルキル基；

ハロゲン原子、 $C_1 \sim C_6$ アルコキシ基、 $C_1 \sim C_6$ アルコキシカルボニル基及びフェノキシ基からなる群から選ばれる同一若しくは異なった1～3個の置換基で置換されてよい $C_2 \sim C_6$ アルケニル基；

5 ハロゲン原子、 $C_1 \sim C_6$ アルコキシ基及びフェノキシ基からなる群から選ばれる同一若しくは異なった1～3個の置換基で置換されてよい $C_2 \sim C_6$ アルキニル基；

10 ハロゲン原子、同一若しくは異なった1～3個のハロゲン原子で置換されてよい $C_1 \sim C_6$ アルキル基、 $C_1 \sim C_6$ アルコキシ基、同一若しくは異なった1～2個の $C_1 \sim C_6$ アルキル基又はアシル基で置換されてよいアミノ基、ニトロ基、シアノ基、水酸基、メルカプト基及び $C_1 \sim C_6$ アルキルチオ基からなる群から選ばれる同一若しくは異なった1～6個の置換基で置換されてよいアリール基；

ハロゲン原子、同一若しくは異なった1～3個のハロゲン原子で置換されてよい $C_1 \sim C_6$ アルキル基及び $C_1 \sim C_6$ アルコキシ基からなる群から選ばれる同一若しくは異なった1～6個の置換基で置換されてよいヘテロアリール基；

15 $C_1 \sim C_6$ アルコキシ基；

同一若しくは異なった1～2個の $C_1 \sim C_6$ アルキル基又はアシル基で置換されてよいアミノ基；

アシル基；

シアノ基；又は、

20 $C_1 \sim C_6$ アルキル基、 $C_2 \sim C_6$ アルケニル基、 $C_2 \sim C_6$ アルキニル基、アラキル基、アリール基及びヘテロアリール基からなる群から選ばれる置換基で水酸基の水素原子が置換されてよいN-ヒドロキシアルカンイミドイル基を表し、

Yは、ハロゲン原子、 $C_1 \sim C_6$ アルキル基、 $C_1 \sim C_6$ アルコキシ基及び水酸基からなる群から選ばれる置換基を表し、

25 nは、0～4の整数を表し、

mは、0～6の整数を表す)

で表される化合物又はその塩。

2. R^1 及び R^2 が、ハロゲン原子、 $C_1 \sim C_6$ アルコキシ基及びフェノキシ基からなる群から選ばれる同一若しくは異なった1～3個の置換基で置換されてよい

C₁~C₆アルキル基、又は、ハロゲン原子、C₁~C₆アルキル基、C₁~C₆アルコキシ基及び水酸基からなる群から選ばれる同一若しくは異なった1~6個の置換基で置換されてよいアリール基である、請求項1に記載の化合物又はその塩。

3. R¹及びR²が、同一若しくは異なった1~3個のハロゲン原子で置換されてよいC₁~C₆アルキル基、又は、同一若しくは異なった1~6個のハロゲン原子で置換されてよいフェニル基である、請求項1又は2に記載の化合物又はその塩。

4. R¹及びR²が、メチル基、エチル基、プロピル基、トリフルオロメチル基、トリフルオロエチル基、フェニル基、フルオロフェニル基、クロロフェニル基である、請求項1~3のいずれか1項に記載の化合物又はその塩。

5. R³、R⁴が、水素原子、ハロゲン原子、又はC₁~C₆アルキル基である、請求項1~4のいずれか1項に記載の化合物又はその塩。

6. Xが、ハロゲン原子；C₁~C₆アルキル基；C₂~C₆アルキニル基；ハロゲン原子、同一若しくは異なった1~3個のハロゲン原子で置換されてよいC₁~C₆アルキル基及びC₁~C₆アルコキシ基からなる群から選ばれる同一若しくは異なった1~6個の置換基で置換されてよいアリール基；ハロゲン原子、同一若しくは異なった1~3個のハロゲン原子で置換されてよいC₁~C₆アルキル基及びC₁~C₆アルコキシ基からなる群から選ばれる同一若しくは異なった1~6個の置換基で置換されてよいヘテロアリール基；シアノ基；又は、C₁~C₆アルキル基及びフェニル基からなる群から選ばれる置換基で水酸基の水素原子が置換されてよいN-ヒドロキシアルカンイミドイル基であり、nが、0~2の整数である、請求項1~5のいずれか1項に記載の化合物又はその塩。

7. Xが、ハロゲン原子；C₁~C₆アルキル基；C₂~C₆アルキニル基；ハロゲン原子、同一若しくは異なった1~3個のハロゲン原子で置換されてよいC₁~C₆アルキル基及びC₁~C₆アルコキシ基からなる群から選ばれる同一若しくは異なった1~6個の置換基で置換されてよいヘテロアリール基；シアノ基；又は、C₁~C₆アルキル基及びフェニル基からなる群から選ばれる置換基で水酸基の水素原子が置換されてよいN-ヒドロキシアルカンイミドイル基であり、nが、0~2の整数である、請求項1~6のいずれか1項に記載の化合物又はその塩。

8. Xが、フッ素原子、塩素原子、臭素原子、メチル基、エチニル基、フリル基、チエニル基、シアノ基、メトキシエタンイミドイル基、エトキシエタンイミドイル基、フェノキシエタンイミドイル基であり、nが、0又は1である、請求項1～7のいずれか1項に記載の化合物又はその塩。

5 9. Yが、フッ素原子、塩素原子又はメチル基であり、mが、0又は1である、請求項1～8のいずれか1項に記載の化合物又はその塩。

10. Yが、メチル基であり、mが、0又は1である、請求項1～9のいずれか1項に記載の化合物又はその塩。

10 11. 3-(5-フルオロ-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン、

3-(5-クロロ-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン、

3-(5-ブロモ-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン、

15 3-(5-エチニル-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン、

3-(5, 6-ジフルオロ-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン、

20 3-(3-エチル-5-フルオロ-3-メチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン、

3-(5-フルオロ-3-メチル-3-プロピル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン、

3-(3-メチル-3-トリフルオロメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン、

25 3-[3-メチル-3-(2, 2, 2-トリフルオロエチル)-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル]キノリン、

3-(3-メチル-3-フェニル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン、

3-[3-メチル-3-(4-フルオロフェニル)-3, 4-ジヒドロイソキノ

リン-1-イル]キノリン、

3-[3-メチル-3-(4-クロロフェニル)-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル]キノリン、

5 3-(5-フルオロ-3, 3, 4, 4-テトラメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)-6-フルオロキノリン、

3-(5-フルオロ-3, 3, 4, 4-テトラメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)-8-フルオロキノリン、

3-(5-フルオロ-3, 3, 4, 4-テトラメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)-8-メチルキノリン、

10 3-(4, 5-ジフルオロ-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン、

3-(4, 4-ジフルオロ-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン、

15 3-(4, 4, 5-トリフルオロ-3, 3-ジメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン、

5-フルオロ-3, 3, 4, 4-テトラメチル-8b-キノリン-3-イル-4, 8b-ジヒドロ-3H-オキサジレノ[3, 2-a]イソキノリン、

3, 3, 4, 4-テトラメチル-8b-キノリン-3-イル-4, 8b-ジヒドロ-3H-オキサジレノ[3, 2-a]イソキノリン、

20 5-フルオロ-3, 3-ジメチル-8b-キノリン-3-イル-4, 8b-ジヒドロ-3H-オキサジレノ[3, 2-a]イソキノリン、

6-フルオロ-3, 3, 4, 4-テトラメチル-8b-キノリン-3-イル-4, 8b-ジヒドロ-3H-オキサジレノ[3, 2-a]イソキノリン、

25 4', 4'-ジメチル-8b'-キノリン-3-イル-4', 8b'-ジヒドロスピロ[シクロペンタン-1, 3'-オキサジレノ[3, 2-a]イソキノリン]、

4, 4, 5-トリフルオロ-3, 3-ジメチル-8b-キノリン-3-イル-4, 8b-ジヒドロ-3H-オキサジレノ[3, 2-a]イソキノリン、

3-(5-フルオロ-3, 3, 4, 4-テトラメチル-2-オキシド-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル)キノリン、

3- (3, 3, 4, 4-テトラメチル-2-オキシド-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン、

3- (6-フルオロ-3, 3, 4, 4-テトラメチル-2-オキシド-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン、

5 3- (6-クロロ-3, 3, 4, 4-テトラメチル-2-オキシド-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン、

3- (4, 4-ジフルオロ-3, 3-ジメチル-2-オキシド-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン、

10 3- (4, 4, 5-トリフルオロ-3, 3-ジメチル-2-オキシド-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリンもしくは

3- (5-フルオロ-3, 3, 4, 4-テトラメチル-3, 4-ジヒドロイソキノリン-1-イル) キノリン又はその塩である、請求項1に記載の化合物又はその塩。

15 12. 請求項1～11のいずれか1項に記載の化合物又はその塩を有効成分として含有する農薬。

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

 International application No.
 PCT/JP2005/001171

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

 Int.Cl⁷ C07D401/04, A01N43/42, 43/90, C07D401/14, 409/14, 413/14,
 498/04

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

 Int.Cl⁷ C07D401/00-421/14, 498/00-498/04, A01N43/00-43/90

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

| | | | |
|---------------------------|-----------|----------------------------|-----------|
| Jitsuyo Shinan Koho | 1922-1996 | Jitsuyo Shinan Toroku Koho | 1996-2005 |
| Kokai Jitsuyo Shinan Koho | 1971-2005 | Toroku Jitsuyo Shinan Koho | 1994-2005 |

 Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)
 CAPLUS (STN), REGISTRY (STN), WPI (DIALOG)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

| Category* | Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages | Relevant to claim No. |
|-----------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------|
| A | CHAKRAVORTI, S.S. et al., Isoquinolylquinoline Derivatives: Part III-Synthesis of Some 4-Substituted 3-(3',4'-Dihydro-1'-isoquinolyl)quinoline Derivatives as Possible Antifilarial Agents. Indian J.Chem., Sect.B, 1985, 24B(7), pages 737 to 746 | 1-12 |
| A | DAS, M. et al., Isoquinolylquinoline Derivatives: Part IV-Synthesis of Some 4-Substituted 3-(3',4'-Dihydro-3'methyl-1'-isoquinolyl)-7-chloro-quinoline Derivatives as Possible Trypanocidal Agents. Indian J. Chem., Sect.B, 1986, 25(B), pages 1072 to 1078 | 1-12 |

☐ Further documents are listed in the continuation of Box C.

☐ See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date

"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

"&" document member of the same patent family

 Date of the actual completion of the international search
 08 April, 2005 (08.04.05)

 Date of mailing of the international search report
 26 April, 2005 (26.04.05)

 Name and mailing address of the ISA/
 Japanese Patent Office

Authorized officer

Facsimile No.

Telephone No.

A. 発明の属する分野の分類 (国際特許分類 (IPC))

Int.Cl.⁷ C07D401/04, A01N43/42, 43/90, C07D401/14, 409/14, 413/14, 498/04

B. 調査を行った分野

調査を行った最小限資料 (国際特許分類 (IPC))

Int.Cl.⁷ C07D401/00-421/14, 498/00-498/04, A01N43/00-43/90

最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの

| | |
|-------------|------------|
| 日本国実用新案公報 | 1922-1996年 |
| 日本国公開実用新案公報 | 1971-2005年 |
| 日本国実用新案登録公報 | 1996-2005年 |
| 日本国登録実用新案公報 | 1994-2005年 |

国際調査で使用した電子データベース (データベースの名称、調査に使用した用語)

CAPLUS (STN), REGISTRY (STN), WPI (DIALOG)

C. 関連すると認められる文献

| 引用文献の カテゴリー* | 引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示 | 関連する 請求の範囲の番号 |
|-----------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------|
| A | CHAKRAVORTI, S.S., <i>et al.</i> , Isoquinolylquinoline Derivatives: Part III - Synthesis of Some 4-Substituted 3-(3', 4'-Dihydro-1'-isoquinolyl)quinoline Derivatives as Possible Antifilarial Agents. Indian J. Chem., Sect. B, 1985, 24B(7), pp.737-746 | 1-12 |
| A | DAS, M., <i>et al.</i> , Isoquinolylquinoline Derivatives: Part IV - Synthesis of Some 4-Substituted 3-(3', 4'-Dihydro-3'-methyl-1'-isoquinolyl)-7-chloro-quinoline Derivatives as Possible Trypanocidal Agents. Indian J. Chem., Sect. B, 1986, 25(B), pp.1072-1078 | 1-12 |

C欄の続きにも文献が列挙されている。

パテントファミリーに関する別紙を参照。

* 引用文献のカテゴリー

「A」 特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの

「E」 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの

「L」 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献 (理由を付す)

「O」 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献

「P」 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願

の日の後に公表された文献

「T」 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と矛盾するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの

「X」 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの

「Y」 特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの

「&」 同一パテントファミリー文献

国際調査を完了した日

08.04.2005

国際調査報告の発送日 26.4.2005

国際調査機関の名称及びあて先

日本国特許庁 (ISA/JP)

郵便番号100-8915

東京都千代田区霞が関三丁目4番3号

特許庁審査官 (権限のある職員)

荒木 英 則

4C

9736

電話番号 03-3581-1101 内線 3452